ИЗВЕСТИЯ РАН. ФИЗИКА АТМОСФЕРЫ И ОКЕАНА, 2019, том 55, № 1, с. 17–34

УДК 551.509.333:519.6

МЕТОДЫ УСВОЕНИЯ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ В ЗАДАЧАХ ФИЗИКИ АТМОСФЕРЫ И ОКЕАНА

© 2019 г. В.П. Шутяев

Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН
Россия, 199333 Москва, ул. Губкина, 8
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
"Морской гидрофизический институт РАН"
299011, Севастополь, ул. Капитанская, 2
E-mail: victor.shutyaev@mail.ru

Поступила в редакцию 14.06.2018 г.
После доработки 25.07.2018 г.

В настоящей статье приведен обзор и анализ подходов к усвоению данных в задачах геофизической гидродинамики, начиная с простейших последовательных схем усвоения и заканчивая современными вариационными методами. Особое внимание уделено новому направлению, где автору принадлежит ряд оригинальных результатов, — исследованию задачи вариационного усвоения в слабой формулировке, в частности построению системы оптимальности, и оценке ковариационных матриц ошибок оптимального решения.

Ключевые слова: усвоение данных наблюдений, вариационная задача, оптимальное решение, слабая формулировка, ковариационная матрица

DOI: https://doi.org/10.31857/S0002-351553117-34

ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия в рамках ряда международных программ исследования глобальных изменений на планете Земля производится сбор, обработка и интерпретация данных, а также ретроспективный анализ и развитие качественных моделей подсистем глобальной биогеохимической системы с целью развития прогностических моделей в их связи с современными моделями глобальной климатической системы. В настоящее время разрабатывается скоординированный подход для развития и применения моделей глобальной климатической системы, включающей атмосферу, океаны, криосферу и биосферу, и оценки чувствительности предсказуемости климата с использованием таких совместных моделей.

В связи с исследованиями глобальных изменений на планете Земля возрастает интерес к задачам усвоения и обработки данных наблюдений с целью ретроспективного анализа в различных отраслях знаний. В задачах геофизической гидродинамики, в частности в метеорологии и океанографии, математические модели используются для исследования и предсказания гидродинамических полей. Основой этих моделей являются законы гидродинамики, которые следуют из сохранения массы, импульса, энергии и т. п., что приводит к системам нелинейных уравнений в частных производных. Эти уравнения, хотя и необходимы, но не достаточны для предсказания эволюции полей. Требуется дополнительная информация, включающая, в частности, начальные условия и параметры модели. Эту информацию можно получить с помощью данных наблюдений. Методы усвоения данных используются для того, чтобы предсказать состояние течения в нужный момент на основе учета всех имеющихся наблюдений.

В последние десятилетия достигнут значительный прогресс в науках о Земле благодаря улучшению систем наблюдений и пониманию закономерностей геосистемы. Одним из фундаментальных требований к успешному прогнозу в океанографии является достаточно точное описание начальных условий. Цель ассимиляции, или усвоения данных, — получение наилучшей в некотором смысле оценки состояния физической системы из ее наблюдений и адекватной математической модели.

Техника усвоения данных широко применяется в науках о Земле. Наибольшие приложения она получила в метеорологии и океанографии, где наблюдения атмосферы и океана ассимилируются в атмосферные и океанские модели с целью получения начальных условий (или других параметров модели) для дальнейшего моделирования и прогноза. В последние годы методы усвоения данных начинают применяться и для анализа других наблюдений геосистемы, включая биосферу, криосферу и поверхность почвы.

Исследователи всегда хотели не только знать и понимать климатические и текущие состояния гидродинамических полей в атмосфере и в океане, но и уметь их предсказывать. Чтобы делать прогноз на будущее, необходимо оценить текущее состояние, которое, в свою очередь, зависит от некоторого состояния в прошлом. Первые попытки оценить состояние системы на основе анализа данных наблюдений были сделаны в метеорологии еще в середине XIX века адмиралом Фитцроем, основателем Британской Метеорологической службы. Субъективный анализ (простейшая интерполяция данных) применялся потом Ричардсоном [1], Чарни [2], Филлипсом [3]. Впоследствии объективный анализ заменил ручную графическую интерполяцию данных наблюдений более строгими математическими методами, начиная с полиномиальной интерполяции, последовательных алгоритмов оценивания и заканчивая современными вариационными методами.

Наибольшее развитие методы усвоения данных получили в динамической метеорологии и физической океанографии, а также в оперативном численном прогнозе атмосферных и океанических полей. В настоящее время теоретические и практические идеи ассимиляции данных можно найти в технической [4–5], математической [6–9] и геофизической литературе [10–13]. Седьмой международный симпозиум Всемирной метеорологической организации по ассимиляции данных наблюдений в метеорологии и океанографии (Бразилия, сентябрь 2017 г.: http://www.cptec.inpe.br/das2017/) продемонстрировал существенный прогресс в практическом применении современных методов усвоения, основанных как на подходе оптимального управления (вариационной ассимиляции данных), так и на подходе последовательного оценивания (статистические методы), а также на комбинации обоих подходов (гибридный метод).

В настоящее время в ряде стран проводятся интенсивные исследования по разработке информационно-вычислительных систем (ИВС) с использованием процедур усвоения данных наблюдений (спутниковых, корабельных и др.). Разработку и создание современных информационно-вычислительных систем с полным правом можно отнести к междисциплинарным фундаментальным проблемам информатики, математики, физики и многих других направлений науки и техники. Создание таких ИВС является в наши дни необходимым с точки зрения экономики, национальной безопасности и прочих нужд государства и общества. Важнейшими задачами здесь являются: осуществление оперативного краткосрочного и долгосрочного прогнозов погоды; определение районов повышенной биологической продуктивности; обеспечение безопасности мореплавания и выбор оптимальных маршрутов судов; установление контроля над экологией моря, обнаружение и прослеживание особо опасных явлений типа штормовых нагонов и цунами, предсказание морских катастроф, оценка возможных ущербов от них и рисков, обусловленных этими катастрофами. Для человеческого общества жизненную важность приобретают вопросы контроля и предсказания состояния окружающей среды. Новые геоинформационные технологии, к которым относится технология разработки систем вариационного усвоения данных наблюдений, позволяют создать единую систему контроля и прогноза геосистемы для целей программ глобального мониторинга.

В последние годы происходят качественные изменения систем измерений, мировое научное сообщество получает все больше и больше измерений различных характеристик нашей геосистемы. Поэтому разработка технологий вариационного усвоения данных наблюдений, основанных на современных подходах, является актуальной проблемой.

В настоящей статье мы приведем обзор и анализ подходов к усвоению данных в задачах геофизической гидродинамики, начиная с простейших последовательных схем усвоения и заканчивая современными вариационными методами. Особое внимание уделено новому направлению, где автору принадлежит ряд оригинальных результатов, — исследованию задачи вариационного усвоения в слабой формулировке, в частности построению системы оптимальности, и оценке ковариационных матриц ошибок оптимального решения.

1. МЕТОДЫ И ПОДХОДЫ К УСВОЕНИЮ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ

1.1. Основные обозначения и постановка задачи

Рассмотрим математическую модель, описывающую эволюцию гидродинамической системы (атмосферной, океанской или совместной) в виде

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = M(x,t), \quad t > 0 \\ x\big|_{t=0} = x_0, \end{cases} \tag{1.1}$$

где x — вектор состояния модели, M — соответствующий динамический оператор модели, x_0 — вектор начального состояния. При численном моделировании или прогнозе динамический оператор M в общем случае является нелинейным и детерминированным, в то время как истинное поле течений отличается от (1.1) на случайную или систематическую ошибку. Как правило, в геофизической гидродинамике (1.1) есть система нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, которую в математической литературе часто называют системой с распределенными параметрами. Зависимую переменную x называют "полем".

Наблюдения задаются некоторой вектор-функцией $y^0(t)$, которая удовлетворяет уравнению

$$y^0(t) = H(x^t) + \varepsilon, \tag{1.2}$$

где H — оператор наблюдений, x^t — истинное поле течений, ε — функция ошибки (шум). Функция $y^0(t)$ считается заданной, в то время как информация о функции ε, как правило, отсутствует. Оператор H, так же как M, может быть нелинейным. Он задает отображение вектора состояния в пространство наблюдений.

Строго говоря, уравнения (1.1), (1.2) должны рассматриваться в соответствующих функциональных пространствах, и в каждом конкретном случае для разработки численных алгоритмов важно исследовать вопросы разрешимости и свойства решения задачи.

При дискретизации модели (1.1) по времени с помощью конечных разностей, конечных элементов или (псевдо-) спектральных методов часто приходят к дискретной модели, описывающей переход от момента времени t_i в момент t_{i+1}:

$$x(t_{i+1}) = M_i(x(t_i)), \tag{1.3}$$

где $x(t_i)$ — вектор состояния размерности n, i — номер шага по времени, M_i — разностный оператор динамики вектора состояния. В дискретной модели (1.3) наблюдения y^0 в момент времени t_i задаются уравнением

$$y_i^0 = H_i(x^t(t_i)) + \varepsilon_i, \tag{1.4}$$

где H_i — оператор наблюдений в момент времени $t = t_i$, x^t — истинное состояние, ε_i — функция ошибки. Векторы y_i^0 имеют размерности p_i. В большинстве практических задач p_i много меньше n.

Для предсказания эволюции течений в задачах геофизической гидродинамики требуется дополнительная информация, например, начальные условия и неизвестные параметры модели, которую можно получить с помощью данных наблюдений. Так возникает *задача об усвоении данных*: при заданной функции наблюдений $y^0(t)$ требуется найти, например, неизвестное априори начальное условие так, чтобы вектор состояния x удовлетворял задаче (1.1), а вектор $H(x)$ был в каком-либо смысле близок к $y^0(t)$. Найденное в результате решение x называется оценкой состояния (или анализом) и обозначается x^a.

1.2. Объективный анализ и его обобщения

Первая попытка объективного анализа данных была выполнена Пановски [14] с использованием двумерной (2-D) полиномиальной интерполяции данных наблюдений. В дальнейшем этот подход был развит Гилкристом и Крессманом [15], которые ввели область влияния для каждого наблюдения и предложили использовать так называемое поле начального приближения (background) — поле из предыдущего прогноза.

Подход Бергторссона и Дёёса [16] основан на анализе разности данных наблюдений и начального приближения и оптимизации веса, приписанного каждому наблюдению. Впоследствии этот подход был модифицирован Крессманом [17], который предложил метод последовательных поправок, или SCM-метод (Successive Correction Method), представляющий собой итерационный алгоритм уточнения вектора состояния:

$$x^{k+1} = x^k + W\left(y^0 - H\left(x^k\right)\right),\ k = 0,1,\dots, \quad (1.5)$$

где k — номер итерации, $x^0 = x^b$ — начальное приближение, W — весовой оператор, H — оператор наблюдений из (1.2). После достаточно большого числа итераций $x^a = x^k$ является оценкой состояния. Как было показано в [17], последовательные итерации приближают данные наблюдений на все более мелких масштабах. Недостатком метода является то, что при итерациях мы все точнее воспроизводим данные наблюдений, ошибки которых никак не учитываются. Тем не менее он достаточно широко применяется для оперативного прогноза погоды.

Обобщением метода последовательных поправок для нестационарной задачи (1.1) является метод подгонки (nudging), который заключается в добавлении к правой части динамической системы (1.1) слагаемого вида (1.5):

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = M\left(x,t\right) + W(y^o - H(x)), \quad t \in \left(0,T\right) \\ x\big|_{t=0} = x_0. \end{cases} \quad (1.6)$$

Это слагаемое заставляет решение модели как можно точнее воспроизводить данные наблюдений. Впервые этот метод был использован в метеорологии в работе [18], а позднее в океанографии в работах [19–21]. Этот метод вызывает интерес до сих пор, появились его новые варианты, в частности BFN-алгоритм [22].

1.3. Статистические методы, последовательные алгоритмы усвоения

Очень важным прорывом в решении задач усвоения данных было использование техники статистической интерполяции. Этот подход восходит к А.Н. Колмогорову (1941), работам Н. Винера (1949), а в науках о Земле он стал известен благодаря монографии Л.С. Гандина [23]. Этот подход также называют оптимальной интерполяцией (OI – Optimal Interpolation) [24–25]. Наблюдениям присваивают веса, которые связаны с ошибками наблюдений. В то же время поле начального приближения не является первым приближением для анализа, как ранее, а используется вместе со своей характеристикой ошибки наряду с другими данными наблюдений.

Пусть оператор наблюдений H – линейный, а функция наблюдений y° и поле первого приближения x^b заданы в виде:

$$y^0 = Hx^t + \varepsilon, \quad x^b = x^t + \varepsilon_b, \quad (1.7)$$

где ошибки ε и ε_b предполагаются случайными гауссовскими векторами с нулевым математическим ожиданием и ковариационными матрицами

$$R = E(\varepsilon\varepsilon^T), \quad B = E(\varepsilon_b{\varepsilon_b}^T). \quad (1.8)$$

Задача оптимальной интерполяции состоит в том, чтобы на основе данных (1.7)–(1.8) найти оценку x^a, минимизирующую отклонение $x^t - x^a$, например, в смысле минимального следа ковариационной матрицы анализа:

$$trE[(x^t - x^a)(x^t - x^a)^T] \to \min. \quad (1.9)$$

Тогда метод оптимальной интерполяции состоит в определении анализа x^a по формуле [11–12]:

$$x^a = x^b + BH^*\left(HBH^* + R\right)^{-1}\left(y^0 - Hx^b\right), \quad (1.10)$$

где H^* – оператор, сопряженный к H.

Согласно (1.10), анализ x^a вычисляется как поле начального приближения x^b плюс поправка, которая есть не что иное как результат действия некоторого весового оператора на вектор $y^0 - Hx^b$. Последний называют инновационным вектором (innovation vector) или невязкой наблюдений.

Нетрудно видеть, что метод оптимальной интерполяции в виде (1.10) эквивалентен задаче оптимального управления, сводящейся к нахождению минимума квадратичного функционала:

$$J(x) = $$
$$= \frac{1}{2}(B^{-1}(x - x^b), x - x^b) + \frac{1}{2}(R^{-1}(Hx - y^0), Hx - y^0).$$

Для этого следует потребовать обращения в нуль его первой производной:

$$J'_x\,(x)\delta x =$$
$$= (B^{-1}(x - x^b), \delta x) + (R^{-1}(Hx - y^0), H\delta x) = 0.$$

Отсюда получаем:

$$x^a = (B^{-1} + H^*R^{-1}H)^{-1}(B^{-1}x^b + H^*R^{-1}y^0) =$$
$$= x^b + BH^*\left(HBH^* + R\right)^{-1}\left(y^0 - Hx^b\right).$$

Алгоритм оптимальной интерполяции (1.10) можно разбить на шаги:

$$\left(HBH^* + R\right)\xi = y^0 - Hx^b, \tag{1.11}$$

$$\theta = BH^*\xi, \tag{1.12}$$

$$x^a = x^b + \theta, \tag{1.13}$$

где уравнение (1.11) записано в пространстве наблюдений, а (1.12)–(1.13) — в пространстве состояний.

Метод оптимальной интерполяции применялся во многих оперативных центрах, начиная с конца 1970-х годов [24, 26]. В дальнейшем этот метод получил развитие в работах Лоренца [27–28], который использовал различные аппроксимации для решения уравнений (1.11)–(1.13) и ввел метод коррекции анализа, являющийся "гибридом" оптимальной интерполяции и последовательных поправок.

Метод оптимальной интерполяции и его модификации до настоящего времени наиболее широко используются для операционного анализа данных при предсказании погоды [27, 29–32], а также при ассимиляции океанографических данных [33–35]. Большую популярность приобрел метод ансамблевой оптимальной интерполяции (EnOI) [36, 37], который позволяет строить параллельные алгоритмы усвоения данных [38].

Обобщением метода оптимальной интерполяции является фильтр Калмана, на каждом шаге экстраполирующий динамические переменные и их ковариации, а затем рекурсивно уточняющий оценку состояния [39]. Непрерывный аналог этого метода часто называют фильтром Калмана–Бьюси [40]. Существуют различные обобщения этого метода на нелинейный случай [4]. В настоящее время большим успехом пользуется расширенный фильтр Калмана — метод EKF (extended Kalman filter) [41–42], который использует линеаризацию модели около некоторого известного состояния. Значительный вклад в разработку методов фильтра Калмана и методов четырехмерного анализа гидрофизических полей на основе динамико-стохастических моделей океана внесли работы А.С. Саркисяна, В.В. Кныша, Г.А. Коротаева и др. [43–47]. В последние годы большую популярность приобретает ансамблевый фильтр Калмана — метод EnKF (ensemble Kalman filter) [48–50], основанный на использовании метода Монте-Карло на каждом временном шаге.

1.4. Вариационные методы

Значительным прогрессом в решении задач усвоения данных было применение вариационных методов и, в частности, методов оптимального управления. Очень плодотворной оказалась идея минимизировать некоторый функционал, связанный с данными наблюдений, на траекториях (решениях) рассматриваемой модели. Тем самым задача об усвоении данных формулируется как задача оптимального управления. Теоретические основы исследования и решения таких задач заложены в классических работах Р. Беллмана (1957), Л.С. Понтрягина (1962), Н.Н. Красовского (1969), Ж.-Л. Лионса (1968), Г.И. Марчука (1961) и др. Впервые вариационный формализм был использован в метеорологии Сасаки [51–52], а в задачах динамической океанографии — Ле Прово и Сальмоном [53].

При решении задач минимизации возникает необходимость вычислять градиент исходного функционала. Важным шагом в этом направлении было использование теории сопряженных уравнений (Марчук Г.И., 1964; Лионс Ж.-Л., 1968). Начиная с известных работ (Пененко В.В. [54], Марчук Г.И., Пененко В.В. [55]; Le Dimet F.-X., Talagrand O. [56], Lewis J.M., Derber J.C. [57]), применение сопряженных уравнений для исследования и численного решения задач об усвоения данных (в том числе для вычисления градиента функционала) широко практикуется многими исследователями [58–68].

Первые применения трехмерного вариационного усвоения данных (3D-VAR) для операционного анализа были сделаны в Национальном Центре по прогнозированию окружающей среды NCEP [69], а позднее в Европейском Центре среднесрочных прогнозов погоды ECMWF [70].

В настоящее время все больший интерес вызывает четырехмерное усвоение данных (4D-VAR), при котором линеаризованные модели и сопряженные к ним используются для усвоения данных наблюдений не в конкретный момент времени, а на заданном временном интервале. Впервые система 4D-VAR была применена в Европейском Центре прогноза погоды [71].

Остановимся на постановке задачи четырехмерного вариационного усвоения данных на примере задачи о восстановлении начального условия. Рассмотрим задачу (1.1) на интервале $(0,T)$:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = M(x,t), \quad t \in (0,T) \\ x|_{t=0} = x_0 \end{cases} \tag{1.14}$$

и введем функционал от ее решения:

$$J(x_0) = \frac{1}{2}\left(C_1\left(x|_{t=0} - x_0^b\right), x|_{t=0} - x_0^b\right) + \\ + \frac{1}{2}\int_0^T \left(C_2\left(Hx - y^0\right), Hx - y^0\right)dt, \tag{1.15}$$

где H – (линейный) оператор наблюдений из (1.2), y^0 – функция наблюдений, x_0^b – заданный вектор, C_1, C_2 – весовые операторы, $(\cdot,\cdot)$ – скалярное произведение. Как правило, C_1, C_2 выбираются в виде: $C_1 = B^{-1}$, $C_2 = R^{-1}$, где B, R – ковариационные матрицы векторов $\varepsilon_b = x_0^b - x^t|_{t=0}$ и $\varepsilon = y^0 - Hx^t$ соответственно: $B = E(\varepsilon_b \varepsilon_b{}^T)$, $R = E(\varepsilon\varepsilon^T)$ в предположении, что ε и ε_b – случайные гауссовские векторы с нулевым математическим ожиданием. Такие весовые операторы (или их приближения) часто применяются в практических задачах [12, 72–73].

Предположим, что начальное условие x_0 из (1.14) нам неизвестно. Тогда простейшая *задача об усвоении данных* формулируется следующим образом: найти x_0, x такие, что они удовлетворяют (1.14) и на множестве решений (1.14) функционал (1.15) достигает своего наименьшего значения. Другими словами,

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = M(x,t), \quad t \in (0,T) \\ x|_{t=0} = x_0, \\ J(x_0) = \inf\limits_v J(v). \end{cases} \tag{1.16}$$

Необходимое условие оптимальности [6] приводит эту задачу к системе для трех неизвестных x_0, x, x^*:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = M(x,t), \quad t \in (0,T) \\ x|_{t=0} = x_0, \end{cases} \tag{1.17}$$

$$\begin{cases} -\dfrac{dx^*}{dt} = \left(M'(x,t)\right)^* x^* - H^* C_2\left(Hx - y^0\right), \quad t \in (0,T) \\ x^*|_{t=T} = 0, \end{cases} \tag{1.18}$$

$$C_1\left(x_0 - x_0^b\right) - x^*|_{t=0} = 0, \tag{1.19}$$

где $\left(M'(x,t)\right)^*$ – оператор, сопряженный к производной динамического оператора модели M. Система (1.17)–(1.19) носит название "системы оптимальности" и играет важную роль для исследования и численного решения задач об усвоении данных. Эта система может быть получена также из принципа максимума Понтрягина, сформулированного для задачи (1.16) [61], или методом множителей Лагранжа [74].

Разрешимость нелинейных задач об усвоении данных и строгое обоснование численных методов их решения – непростая проблема. Достаточно полные результаты, касающиеся разрешимости линейных задач оптимального управления вида (1.16)–(1.19), были получены Ж.-Л. Лионсом с использованием разработанного им общего подхода HUM (Hilbert Uniqueness Method). Некоторые результаты о разрешимости слабонелинейных задач усвоения данных были получены в работах [60, 67, 75]. Дальнейшие обобщения и новые приложения были предложены в последние годы [68, 76, 77].

Численное решение задач вида (1.16) осуществляется в настоящее время известными алгоритмами оптимизации, разработанными в классических трудах. Ряд новых итерационных алгоритмов решения задач об усвоении данных с использованием сопряженных уравнений предложены в работах [60–63, 67, 68] и др.

Для построения численного алгоритма решения задачи об усвоении данных можно использовать известные методы минимизации для задачи (1.16), либо решать систему оптимальности (1.17)–(1.19). При численном решении задачи часто необходимо вычислять градиент исходного функционала J. Это можно делать с помощью выбранной подходящим образом сопряженной задачи. В рассматриваемом случае градиент функционала вычисляется следующим образом: при заданном v находим последовательно решения прямой и сопряженной задач

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = M(x,t), \quad t \in (0,T) \\ x|_{t=0} = v, \end{cases} \tag{1.20}$$

$$\begin{cases} -\dfrac{dx^*}{dt} = \left(M'(x,t)\right)^* x^* - H^* C_2\left(Hx - y^0\right), \quad t \in (0,T) \\ x^*|_{t=T} = 0 \end{cases} \tag{1.21}$$

и полагаем

$$J'(v) = C_1\left(v - x_0^b\right) - x^*\big|_{t=0}. \qquad (1.22)$$

В работах многих авторов большое внимание уделяется численному построению сопряженной модели (1.21), которая может быть получена как путем дискретизации непрерывной задачи (1.21) [66, 78, 79], так и непосредственным транспонированием кода дискретной линеаризованной задачи [68, 80, 81]. В последнем случае зачастую используют методы автоматического дифференцирования [74, 82–83]. Сравнение этих двух подходов к построению дискретной сопряженной задачи проводится, например, в работах [78, 84].

Наряду с исследованием разрешимости, разработкой и обоснованием алгоритмов численного решения задач вариационного усвоения данных, важную роль играют свойства самого оптимального решения. Чрезвычайно важным является вопрос о чувствительности оптимальных решений задач вариационного усвоения к погрешностям данных наблюдений и погрешностям моделей. До недавнего времени этот вопрос оставался малоисследованным, но в последние годы получен ряд результатов с использованием операторов управления [85–92]. Получены и исследованы уравнения для ошибки оптимального решения через погрешности данных наблюдений в задаче восстановления начального условия, исследована чувствительность оптимального решения с использованием сингулярных векторов операторов управления. Оказалось, что важную роль при исследовании ошибок играют фундаментальные функции управления, которые являются сингулярными векторами операторов отклика [85, 88, 90, 92].

Алгоритмы четырехмерного усвоения данных [10, 11, 13] представляются в настоящее время наиболее эффективными. В последние годы появилось много работ по сравнению ансамблевого метода Калмана (EnKF) и вариационного усвоения данных [93–99], кроме того появились так называемый гибридный подход, сочетающий в себе ансамблевый метод Калмана и вариационное усвоение данных – Hybrid 4D-VAR [100–104], а также ансамблевый метод четырехмерного вариационного усвоения 4DEnVar [105–110].

2. КОВАРИАЦИОННЫЕ МАТРИЦЫ ОШИБОК ОПТИМАЛЬНОГО РЕШЕНИЯ

Важной характеристикой оптимального решения, полученного из системы оптимальности задачи вариационного усвоения данных, является апостериорная ковариационная матрица. Данный раздел посвящен разработке алгоритмов для исследования ковариационных операторов ошибок оптимального решения задач вариационного усвоения данных с использованием гессиана функционала стоимости. Теоретические основы алгоритмов были заложены в работах [85, 111–113].

Рассмотрим задачу вариационного усвоения данных на примере задачи инициализации (1.14), для которой справедлива система оптимальности (1.17)–(1.19). Предполагается, что исходные данные заданы с ошибками: $x_0^b = x_0^t + \varepsilon_b, y^0 = Hx^t + \varepsilon$, где $\varepsilon_b \sim N(0,B)$, $\varepsilon \sim N(0,R)$ а x^t – точное решение задачи (1.14) при $x_0 = x_0^t$:

$$\begin{cases} \dfrac{dx^t}{dt} = M\left(x^t, t\right), \quad t \in (0,T) \\ x^t\big|_{t=0} = x_0^t. \end{cases} \qquad (2.1)$$

Здесь $\varepsilon \sim N(0,R)$ означает, что случайная величина ε распределена по гауссовскому закону с нулевым математическим ожиданием и ковариационной матрицей R Мы будем исследовать влияние ошибок $\varepsilon_b, \varepsilon$ на оптимальное решение x_0, полученное в результате решения (1.17)–(1.19), и сформулируем алгоритмы вычисления ковариационных операторов ошибок оптимального решения через гессиан функционала стоимости.

Систему (1.17)–(1.19) с тремя неизвестными x, x^*, x_0 можно рассматривать как одно операторное уравнение вида:

$$F(U, U_d) = 0, \qquad (2.2)$$

где $U = (x, x^*, x_0), U_d = (x_0^b, y^0)$. Аналогичное уравнение имеет место и для точного решения:

$$F(\overline{U}, \overline{U}_d) = 0, \qquad (2.3)$$

где $U = (x^t, x^{*t}, x_0^t), U_d = (x_0^t, Hx^t), x^{*t} = 0$. Система (2.3) есть необходимое условие оптимальности следующей задачи минимизации: найти u и ϕ, такие что

$$\begin{cases} \dfrac{d\phi}{dt} = M(\phi, t), \quad t \in (0,T) \\ \phi\big|_{t=0} = u, \\ \overline{J}(u) = \inf\limits_v \overline{J}(v), \end{cases}$$

где

$$\overline{J}(u) = \frac{1}{2}\left(C_1\left(u - x_0^t\right), u - x_0^t\right) + $$
$$+ \frac{1}{2}\int_0^T \left(C_2\left(H\phi - Hx^t\right), H\phi - Hx^t\right)dt.$$

Из (2.2)–(2.3) имеем $F(U,U_d) - F(\overline{U},\overline{U}_d) = 0$. Пусть $\delta U = U - \overline{U}$, $\delta U_d = U_d - \overline{U}_d$. Тогда

$$F(\overline{U} + \delta U, \overline{U}_d + \delta U_d) - F(\overline{U},\overline{U}_d) = 0. \quad (2.4)$$

Пусть $\delta x = x - x^t$, $\delta x_0 = x_0 - x_0^t$, тогда $\delta U = (\delta x, x^*, \delta x_0)$, $\delta U_d = (\varepsilon_b, \varepsilon)$. В предположении, что оператор M достаточно гладкий, существует $\underline{x} = x^t + \tau(x - x^t)$, $\tau \in [0,1]$ такая, что $M(x,t) - M(x^t,t) = M'(\underline{x},t)\delta x$. Тогда уравнение (2.4) эквивалентно системе:

$$\begin{cases} \dfrac{d\delta x}{dt} = M'(\underline{x},t)\delta x, & t \in (0,T) \\ \delta x\big|_{t=0} = \delta x_0, \end{cases} \quad (2.5)$$

$$\begin{cases} -\dfrac{dx^*}{dt} = \left(M'(x,t)\right)^* x^* - H^* C_2\left(H\delta x - \varepsilon\right), & t \in (0,T) \\ x^*\big|_{t=T} = 0, \end{cases} \quad (2.6)$$

$$C_1\left(\delta x_0 - \varepsilon_b\right) - x^*\big|_{t=0} = 0. \quad (2.7)$$

Поскольку $\underline{x} = x^t + \tau\delta x$, $x = x^t + \delta x$, то в предположении малости δx и гладкости M в (2.5)–(2.7) можно положить

$$M'(\underline{x},t) \approx M'(x^t,t), (M'(x,t))^* \approx (M(x^t,t))^*. \quad (2.8)$$

Тогда (2.5)-(2.7) сводится к системе

$$\begin{cases} \dfrac{d\delta x}{dt} = M'(x^t,t)\delta x, & t \in (0,T) \\ \delta x\big|_{t=0} = \delta x_0, \end{cases} \quad (2.9)$$

$$\begin{cases} -\dfrac{dx^*}{dt} = \left(M'(x^t,t)\right)^* x^* - H^* C_2\left(H\delta x - \varepsilon\right), & t \in (0,T) \\ x^*\big|_{t=T} = 0, \end{cases} \quad (2.10)$$

$$C_1\left(\delta x_0 - \varepsilon_b\right) - x^*\big|_{t=0} = 0. \quad (2.11)$$

Система (2.9)–(2.11) есть линейная задача об усвоении данных; при фиксированном x^t – это необходимое условие оптимальности следующей задачи минимизации: найти u и ϕ, такие что

$$\begin{cases} \dfrac{d\phi}{dt} = M'(x^t,t)\phi, & t \in (0,T) \\ \phi\big|_{t=0} = u, \\ J_1(u) = \inf\limits_v J_1(v), \end{cases}$$

где

$$J_1(u) = $$
$$= \frac{1}{2}\left(C_1\left(u - \varepsilon_b\right), u - \varepsilon_b\right) + \frac{1}{2}\int_0^T \left(C_2\left(H\phi - \varepsilon\right), H\phi - \varepsilon\right)dt. \quad (2.12)$$

Рассмотрим гессиан $\mathfrak{H}$ функционала (2.12); он определен на v последовательным решением задач:

$$\begin{cases} \dfrac{d\delta x}{dt} = M'(x^t,t)\delta x, & t \in (0,T) \\ \delta x\big|_{t=0} = v, \end{cases} \quad (2.13)$$

$$\begin{cases} -\dfrac{dx^*}{dt} = \left(M'(x^t,t)\right)^* x^* - H^* C_2 H\delta x, & t \in (0,T) \\ x^*\big|_{t=T} = 0, \end{cases} \quad (2.14)$$

$$\mathfrak{H}v = C_1 v - x^*\big|_{t=0}. \quad (2.15)$$

Введем вспомогательные операторы R_1, R_2. Пусть $R_1 = C_1$, а оператор R_2 определен на функциях g по формуле $R_2 g = \theta^*\big|_{t=0}$, где θ^* – решение сопряженной задачи

$$\begin{cases} -\dfrac{d\theta^*}{dt} = \left(M'(x^t,t)\right)^* \theta^* + H^* C_2 g, \\ \theta^*\big|_{t=T} = 0. \end{cases} \quad (2.16)$$

Из (2.13)–(2.16) заключаем, что система (2.9)–(2.11) эквивалентна уравнению для ошибки δx_0:

$$\mathfrak{H}\delta x_0 = R_1\varepsilon_b + R_2\varepsilon. \quad (2.17)$$

Гессиан $\mathfrak{H}$ по определению симметричный неотрицательно определенный оператор. Мы будем предполагать, что $\mathfrak{H}$ положительно определен и, тем самым, обратим. Тогда уравнение (2.17) можно записать в виде

$$\delta x_0 = T_1\varepsilon_b + T_2\varepsilon, \quad (2.18)$$

где $T_i = \mathfrak{H}^{-1}R_i$, $i = 1,2$.

Мы предполагаем, что ошибки $\varepsilon_b, \varepsilon$ являются случайными, нормально распределенными с нулевым средним и некоррелированными между собой, при этом, как сказано выше, $\varepsilon_b \sim N(0,B), \varepsilon \sim N(0,R)$. Тогда из (2.18) следует, что ошибка δx_0 также нормально распределена с нулевым математическим ожиданием. Через P обозначим ковариационный оператор ошибки оптимального решения: $P = E[\delta x_0 (\delta x_0)^T]$. Из (2.18) получаем

$$P = E[\delta x_0 (\delta x_0)^T] = T_1 B T_1^* + T_2 R T_2^*, \quad (2.19)$$

где T_i^* – операторы, сопряженные к T_i, $i = 1,2$. Для построения оператора P необходимо найти операторы $T_1 B T_1^*$, $T_2 R T_2^*$ Рассмотрим оператор $T_1 B T_1^*$. Поскольку $T_1 = \mathfrak{H}^{-1} R_1 = \mathfrak{H}^{-1} C_1 = T_1^*$, то $T_1 B T_1^* = \mathfrak{H}^{-1} C_1 B C_1 \mathfrak{H}^{-1}$. Более того, если $C_1 = B^{-1}$, то

$$T_1 B T_1^* = \mathfrak{H}^{-1} C_1 B C_1 \mathfrak{H}^{-1} = \mathfrak{H}^{-1} B^{-1} \mathfrak{H}^{-1}. \quad (2.20)$$

Таким образом, алгоритм для вычисления $w = T_1 B T_1^* v$ состоит в следующем:

1) решаем уравнение $\mathfrak{H} p = v$;

2) вычисляем $C_1 p$;

3) решаем уравнение $\mathfrak{H} w = C_1 p$.

В результате формула (2.20) дает вклад ошибки ε_b в ковариационный оператор P.

Рассмотрим теперь оператор $T_2 R T_2^*$. Поскольку $T_2 = \mathfrak{H}^{-1} R_2$, то $T_2 R T_2^* = \mathfrak{H}^{-1} R_2 R R_2^* \mathfrak{H}^{-1}$. Для отыскания R_2^* рассмотрим скалярное произведение $(R_2 g, p)$ при фиксированных g и p. Из (2.16) имеем, что $(R_2 g, p) = (\theta^*|_{t=0}, p) = \int_0^T (H^* C_2 g, \varphi) dt = (g, R_2^* p)$, где $R_2^* p = C_2 H \varphi$, а φ – решение задачи (2.13) при $v = p$. Таким образом, оператор $T_2 R T_2^*$ определяется последовательным решением следующих задач (при заданном v):

$$\mathfrak{H} p = v, \quad (2.21)$$

$$\begin{cases} \dfrac{d\varphi}{dt} = M'(x^t, t)\varphi, \quad t \in (0,T) \\ \varphi|_{t=0} = p, \end{cases} \quad (2.22)$$

$$\begin{cases} -\dfrac{d\theta^*}{dt} = \left(M'(x^t, t)\right)^* \theta^* - H^* C_2 R C_2 H \varphi, \quad t \in (0,T) \\ \theta^*|_{t=T} = 0, \end{cases} \quad (2.23)$$

$$\mathfrak{H} w = \theta^*|_{t=0}. \quad (2.24)$$

Тогда $T_2 R T_2^* v = w$. Если $C_2 = R^{-1}$, то $H^* C_2 R C_2 H = H^* C_2 H$ и из (2.22)–(2.23) получаем, что $\theta^*|_{t=0} = \mathfrak{H} v - C_1 v$, где $\mathfrak{H}$ – гессиан, определенный формулами (2.13)-(2.15). Тогда $R_2 R R_2^* = \mathfrak{H} - C_1$ и

$$T_2 R T_2^* = \mathfrak{H}^{-1}(\mathfrak{H} - C_1)\mathfrak{H}^{-1}. \quad (2.25)$$

Таким образом, алгоритм для вычисления $w = T_2 R T_2^* v$ состоит в следующем:

1) решаем уравнение $\mathfrak{H} p = v$;

2) вычисляем $(\mathfrak{H} - C_1)p$;

3) решаем уравнение $\mathfrak{H} w = (\mathfrak{H} - C_1)p$.

В результате формула (2.25) дает вклад ошибки ε в ковариационный оператор P.

Для вычисления суммарного вклада некоррелированных ошибок $\varepsilon_b, \varepsilon$ следует сложить формулы (2.20) и (2.25). Тогда

$$P = T_1 B T_1^* + T_2 R T_2^* = \mathfrak{H}^{-1} C_1 \mathfrak{H}^{-1} + \mathfrak{H}^{-1}(\mathfrak{H} - C_1)\mathfrak{H}^{-1},$$

откуда получаем:

$$P = \mathfrak{H}^{-1}. \quad (2.26)$$

Последняя формула дает вид ковариационного оператора P через гессиан $\mathfrak{H}$, определенный формулами (2.13)–(2.15). Для вычисления обратного гессиана можно воспользоваться правилом умножения $\mathfrak{H}$ на некоторую функцию v согласно (2.13)–(2.15) или методом BFGS [114–115], который в результате итераций дает приближение для $\mathfrak{H}^{-1}$.

3. СЛАБАЯ ФОРМУЛИРОВКА ВАРИАЦИОННОГО УСВОЕНИЯ ДАННЫХ

Постановку задачи вариационного усвоения данных в виде (1.17)–(1.19) часто называют сильной формулировкой, или постановкой с сильными ограничениями (strong constraint в англоязычной литературе). Сильными ограничениями являются уравнения модели (1.17), которые должны строго выполняться при минимизации функционала (1.15). Существенным недостатком постановки (1.17) является тот факт, что модель предполагается точной и ошибки модели здесь никак не учитываются. Ошибки модели могут быть связаны с дискретизацией, с неточным описанием физических процессов, с погрешностями исходных данных. Чтобы учесть возможные ошибки модели, рассматривают так называемую слабую формулировку, или постановку со слабыми ограничениями (weak constraint) [51–52, 116–125].

В случае слабой формулировки уравнения модели уже не обязательно выполняются точно, и они включаются в исходный функционал стоимости. Так, вместо задачи (1.14) рассмотрим задачу минимизации следующего функционала:

$$J = \frac{1}{2}\left(C_1\left(x|_{t=0} - x_0^b\right), x|_{t=0} - x_0^b\right) + \\ + \frac{1}{2}\int_0^T \left(C_2\left(Hx - y^0\right), Hx - y^0\right)dt + \\ + \frac{1}{2}\int_0^T \left(C_3\left(\frac{dx}{dt} - M(x,t)\right), \frac{dx}{dt} - M(x,t)\right)dt, \tag{3.1}$$

где C_1, C_2, C_3 – весовые операторы: $C_1 = B^{-1}$, $C_2 = R^{-1}$, $C_3 = Q^{-1}$, а B, R, Q – ковариационные матрицы векторов $\varepsilon_b, \varepsilon, \xi$ соответственно: $B = E[\varepsilon_b \varepsilon_b^T]$, $R = E[\varepsilon\varepsilon^T]$, $Q = E[\xi\xi^T]$. Векторы ошибок $\varepsilon_b, \varepsilon$ были введены ранее, а ξ здесь есть ошибка модели: $\xi = M(x^t, t) - \frac{dx^t}{dt}$. Введем обозначение $f = \frac{dx}{dt} - M(x,t)$. Тогда нетрудно видеть, что задачу о минимизации функционала (3.1) по x можно сформулировать в эквивалентном виде, а именно: требуется найти x_0, f такие, что

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = M(x,t) + f, \quad t \in (0,T) \\ x|_{t=0} = x_0, \\ J(x_0, f) = \inf\limits_{v,g} J(v,g), \end{cases} \tag{3.2}$$

где

$$J(x_0, f) = \frac{1}{2}\left(C_1\left(x_0 - x_0^b\right), x_0 - x_0^b\right) + \\ + \frac{1}{2}\int_0^T \left(C_2\left(Hx - y^0\right), Hx - y^0\right)dt + \frac{1}{2}\int_0^T (C_3 f, f)dt.$$

Таким образом, задача минимизации функционала (3.1) опять сводится к задаче с сильными ограничениями, однако здесь неизвестными (управлениями) являются не только функция начального условия x_0, но и правая часть f.

Для построения системы оптимальности вычислим градиенты J по x_0 и f соответственно. По определению градиента

$$J'_{x_0}(x_0, f)\delta x_0 = \\ = \left(C_1\left(x_0 - x_0^b\right), \delta x_0\right) + \int_0^T \left(C_2\left(Hx - y^0\right), H\delta x_1\right)dt,$$

$$J'_f(x_0, f)\delta f = \\ = \int_0^T \left(C_2\left(Hx - y^0\right), H\delta x_2\right)dt + \int_0^T \left(C_3 f, \delta f\right)dt,$$

где δx_1, δx_2 – решения следующих задач:

$$\begin{cases} \frac{d\delta x_1}{dt} = M'(x,t)\delta x_1, \quad t \in (0,T) \\ \delta x_1|_{t=0} = \delta x_0, \end{cases} \tag{3.3}$$

$$\begin{cases} \frac{d\delta x_2}{dt} = M'(x,t)\delta x_2 + \delta f, \quad t \in (0,T) \\ \delta x_2|_{t=0} = 0. \end{cases} \tag{3.4}$$

Нетрудно видеть, что их сумма $\delta x = \delta x_1 + \delta x_2$ удовлетворяет системе в вариациях:

$$\begin{cases} \frac{d\delta x}{dt} = M'(x,t)\delta x + \delta f, \quad t \in (0,T) \\ \delta x|_{t=0} = \delta x_0. \end{cases} \tag{3.5}$$

Для построения градиентов в явном виде введем сопряженную задачу по отношению к (3.5) в виде (1.18). Тогда, пользуясь известным соотношением сопряженности [9], получаем градиенты

$$J'_{x_0}(x_0, f)\delta x_0 = \left(C_1\left(x_0 - x_0^b\right) - x^*|_{t=0}, \delta x_0\right),$$

$$J'_f(x_0, f)\delta f = \int_0^T \left(C_3 f - x^*, \delta f\right)dt,$$

которые следует приравнять к нулю для любых $\delta x_0, \delta f$. Таким образом, необходимое условие оптимальности приводит задачу к системе для четырех неизвестных x_0, f, x, x^*:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = M(x,t) + f, \quad t \in (0,T) \\ x|_{t=0} = x_0, \end{cases} \tag{3.6}$$

$$\begin{cases} -\frac{dx^*}{dt} = \left(M'(x,t)\right)^* x^* - H^* C_2\left(Hx - y^0\right), \quad t \in (0,T) \\ x^*|_{t=T} = 0, \end{cases} \tag{3.7}$$

$$C_1\left(x_0 - x_0^b\right) - x^*|_{t=0} = 0, \tag{3.8}$$

$$C_3 f - x^* = 0. \tag{3.9}$$

Заметим, что сопряженная задача (3.7) в полученной системе оптимальности совпадает с сопряженной задачей (1.18), а условие (3.8) совпадает с (1.19) — условием равенства нулю градиента по x_0.

Построим ковариационную матрицу P ошибок оптимального решения $\delta u = (\delta x_0, \delta f)^T$, где $\delta x_0 = x_0 - x^t\big|_{t=0}, \delta f = f - f^t$, которая определяется по формуле $P = E[\delta u (\delta u)^T]$. Для этой цели аналогично (2.5)–(2.7) запишем систему оптимальности для ошибок, которая в предположении (2.8) сводится к системе:

$$\begin{cases} \dfrac{d\delta x}{dt} = M'\left(x^t, t\right)\delta x + \delta f, \quad t \in (0,T) \\ \delta x\big|_{t=0} = \delta x_0, \end{cases} \tag{3.10}$$

$$\begin{cases} -\dfrac{dx^*}{dt} = \left(M'\left(x^t, t\right)\right)^* x^* - H^* C_2 \left(H\delta x - \varepsilon\right), \quad t \in (0,T) \\ x^*\big|_{t=T} = 0, \end{cases} \tag{3.11}$$

$$C_1\left(\delta x_0 - \varepsilon_b\right) - x^*\big|_{t=0} = 0, \tag{3.12}$$

$$C_3\left(\delta f - \xi\right) - x^* = 0. \tag{3.13}$$

Система (3.10)–(3.13) есть не что иное, как условие оптимальности следующей линейной задачи об усвоении данных: найти $\delta x_0, \delta f$ такие, что

$$\begin{cases} \dfrac{d\delta x}{dt} = M'\left(x^t, t\right)\delta x + \delta f, \quad t \in (0,T) \\ x\big|_{t=0} = \delta x_0, \\ J_2\left(\delta x_0, \delta f\right) = \inf\limits_{v,g} J_2\left(v, g\right), \end{cases} \tag{3.14}$$

где

$$J_2(\delta x_0, \delta f) = \frac{1}{2}\left(C_1\left(\delta x_0 - \varepsilon_b\right), \delta x_0 - \varepsilon_b\right) + \\ + \frac{1}{2}\int_0^T \left(C_2\left(H\delta x - \varepsilon\right), H\delta x - \varepsilon\right) dt + \\ + \frac{1}{2}\int_0^T \left(C_3(\delta f - \xi), f - \xi\right) dt.$$

Введем в рассмотрение гессиан $\mathfrak{H}$ функционала J_2, он определяется на $u = (v, g)^T$ последовательным решением задач:

$$\begin{cases} \dfrac{d\delta x}{dt} = M'\left(x^t, t\right)\delta x + g, \quad t \in (0,T) \\ \delta x\big|_{t=0} = v, \end{cases} \tag{3.15}$$

$$\begin{cases} -\dfrac{dx^*}{dt} = \left(M'\left(x^t, t\right)\right)^* x^* - H^* C_2 H\delta x, \quad t \in (0,T) \\ x^*\big|_{t=T} = 0, \end{cases} \tag{3.16}$$

$$\mathfrak{H} v = (C_1 v - x^*\big|_{t=0}, C_3 g - x^*)^T. \tag{3.17}$$

Тогда нетрудно видеть, что система (3.10)–(3.13) эквивалентна уравнению для ошибки $\delta u = (\delta x_0, \delta f)^T$:

$$\mathfrak{H}\delta u = \mathfrak{R}_1 \Xi + \mathfrak{R}_2 \varepsilon, \tag{3.18}$$

где

$$\Xi = (\varepsilon_b, \xi)^T, \mathfrak{R}_1 \Xi = (C_1 \varepsilon_b, C_3 \xi)^T, \mathfrak{R}_2 \varepsilon = (\theta^*\big|_{t=0}, \theta^*)^T,$$

а θ^* — решение сопряженной задачи (2.16). В предположении обратимости оператора $\mathfrak{H}$ из (3.18) имеем

$$\delta u = \mathfrak{I}_1 \Xi + \mathfrak{I}_2 \varepsilon, \tag{3.19}$$

где $\mathfrak{I}_i = \mathfrak{H}^{-1}\mathfrak{R}_i, i = 1, 2$. Последнее уравнение можно использовать для построения ковариационного оператора P ошибок оптимального решения: $P = E[\delta u (\delta u)^T]$. Из (3.19) получаем

$$P = \mathfrak{I}_1 V_\Xi \mathfrak{I}_1^* + \mathfrak{I}_2 R \mathfrak{I}_2^*, \tag{3.20}$$

где $V_\Xi = E[\Xi\Xi^T] = \begin{pmatrix} B & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix}$, в предположении, что ошибки $\varepsilon_b, \varepsilon, \xi$ некоррелированы. Следуя схеме доказательства (2.20)–(2.25), можно показать, что

$$\mathfrak{I}_1 V_\Xi \mathfrak{I}_1^* = \mathfrak{H}^{-1} V_\Xi^{-1} \mathfrak{H}^{-1}, \ \mathfrak{I}_2 R \mathfrak{I}_2^* = \mathfrak{H}^{-1}(\mathfrak{H} - V_\Xi^{-1})\mathfrak{H}^{-1}, \tag{3.21}$$

где $\mathfrak{H}$ — гессиан, определенный формулами (3.15)–(3.17). Тогда из (3.21) заключаем:

$$P = \mathfrak{H}^{-1}. \tag{3.22}$$

Таким образом, получаем результат, аналогичный (2.26), только с другим оператором $\mathfrak{H}$.

Оператор $\mathfrak{H}$, определенный формулами (3.15)–(3.17), может быть записан в матричном виде:

$$\mathfrak{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix},$$

где H_{ij} — комбинации производных по x и f. Таким образом, размерность $\mathfrak{H}$ в данном случае увеличивается на порядок по сравнению с (2.26), поскольку в задаче (3.2) требуется найти не только функцию начального условия x_0, но и правую часть f, которая зависит от временной и пространственных переменных. Другие способы учета ошибки модели с использованием понижения размерности задачи рассмотрены в работах [119–121, 124–125].

4. СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ 4D-VAR И АНСАМБЛЕВОГО ФИЛЬТРА КАЛМАНА

Как следует из представленного выше обзора, новые поколения схем ассимиляции базируются на четырехмерном вариационном усвоении данных (4D-VAR) и ансамблевом фильтре Калмана (EnKF). Каждый из этих современных подходов имеет свои достоинства и недостатки, и их сравнительному анализу посвящено немало работ (см., например, [93–99]).

В случае линейной модели, линейного оператора наблюдений и гауссовских ошибок методы 4D-VAR и фильтр Калмана дают идентичные результаты в конце "окна" ассимиляции, если ошибки модели не учитываются [27]. В тех же предположениях при достаточно большом числе элементов ансамбля метод EnKF хорошо аппроксимирует фильтр Калмана [36]. Нелинейности модели и оператора наблюдений (и как следствие, негауссовость ошибок) являются потенциальной причиной расхождения результатов при применении 4D-VAR и EnKF [95]. В том случае, когда ошибки наблюдений и начального приближения остаются гауссовскими, а модель динамики нелинейна, метод 4D-VAR дает оценку максимального правдоподобия – моду функции распределения апостериорной условной вероятности [126]. В то же время в общем случае неясно, как отыскание такой моды связано с результатом метода EnKF [95].

В большинстве задач геофизической гидродинамики размерность вектора состояния системы столь велика, что приходится искать компромисс между вычислительными возможностями и теоретически оптимальными подходами. Например, методу EnKF присущи ошибки выборки (sampling errors) из-за ограниченного размера ансамбля, а в методе 4D-VAR из-за большой размерности приходится искать аппроксимации ковариационных матриц начального приближения, что также приводит к ошибкам, которые трудно оценить при сравнительном анализе методов.

Как мы видели выше, четырехмерное вариационное усвоение данных (4D-VAR) в виде (1.17)–(1.19) использует прямые и сопряженные модели для оценки состояния системы, которая максимально точно воспроизводит данные наблюдений на заданном временном интервале в смысле минимизации функционала стоимости (1.15). Следует отметить, что в методе 4D-VAR задачи (1.16) и (1.17)–(1.19) решаются сразу на всем интервале по времени $(0,T)$.

В отличие от 4D-VAR, метод EnKF ассимилирует наблюдения последовательно. При заданных наблюдениях y_i^0 в момент времени t_i для применения метода требуется ансамбль вектора состояний x_i^f с предыдущего шага t_{i-1}. Метод EnKF состоит в построении поправки к математическому ожиданию (среднему по ансамблю) $\bar{x}_i^f$ согласно формуле:

$$\bar{x}_i^a = \bar{x}_i^f + \tilde{K}\left(y_i^0 - H\left(\bar{x}_i^f\right)\right), \tag{4.1}$$

где $\bar{x}_i^a$ – средняя по ансамблю оценка состояния (анализ) в момент времени t_i, H – оператор наблюдений, а матрица $\tilde{K}$ является обобщением матрицы Калмана (gain matrix):

$$K = P_i^f H^*\left(HP_i^f H^* + R\right)^{-1}, \tag{4.2}$$

где P_i^f – ковариационная матрица ошибок состояния в момент t_i. Для получения $\tilde{K}$ ковариационные матрицы в определении (4.2) заменяются ковариационными матрицами выборки, построенными на основе ансамбля. Таким образом, метод EnKF строит поправки к $\bar{x}_i^f$ с учетом неопределенностей в данных наблюдений y_i^0. Эта схема дает ансамбль состояний в момент t_i, который в дальнейшем служит в качестве начального условия для ансамбля в момент t_{i+1}.

Итак, уже в самих постановках (1.16) и (4.1)–(4.2) заложено различие в упомянутых подходах: метод 4D-VAR минимизирует функционал $J(x)$ сразу на всем временном интервале $(0,T)$, в то время как метод EnKF ассимилирует наблюдения последовательно в каждый конкретный момент времени. В отличие от 4D-VAR, ковариационная матрица анализа P_i^f играет ключевую роль при ассимиляции методом EnKF, где оценки этих матриц уточняются на каждом шаге по времени.

При больших размерностях вектора состояния работа с ковариационными матрицами в методе EnKF становится серьезной вычислительной проблемой. Использование ограниченного числа элементов ансамбля приводит к ухудшению аппроксимации фильтра Калмана. С другой стороны, в методе 4D-VAR при использовании итерационных градиентных методов приходится строить и решать линеаризованные прямые и сопряженные задачи, что зачастую является большой проблемой для сложных геофизических моделей. Так, построение сопряженной модели для известной системы усвоения данных NEMOVAR заняло немало человеко-часов [73].

Численные сравнения 4D-VAR и EnKF [93–99] показали, что эти методы зачастую дают близкие результаты. Для малых интервалов по времени EnKF дает более точные результаты. Для наблюдений с пропусками в данных, когда ансамблевые возмущения растут нелинейно и становятся негауссовскими, 4D-VAR приводит к меньшим ошибкам, чем EnKF [94]. Однако с точки зрения распараллеливания вычислений, EnKF оказывается предпочтительным, поскольку вычисления для каждого члена ансамбля можно проводить независимо [99].

При описании реальных физических систем, таких как атмосфера и океан, в моделях появляются ошибки из-за неточного задания форсинга (правой части или краевых условий), параметризаций подсеточных процессов, низкого разрешения и т. п. Ошибки могут быть систематическими, случайными, ошибками параметров модели или физических параметризаций. В этом случае применяется 4D-VAR в слабой формулировке (weak constraint) [116], описанной в разделе 3. С одной стороны, этот подход предъявляет высокие требования к вычислительным системам в силу высокой размерности вектора состояния системы, в современных численных моделях прогноза погоды достигающих $\sim 10^9$. С другой стороны, этот подход может привести к улучшению точности прогноза и увеличению "окна" усвоения данных за счет рассмотрения расширенного функционала стоимости в виде (3.1).

В методе EnKF слабая формулировка возникает естественным образом путем добавления в саму постановку задачи ковариационной матрицы ошибок модели, оценка которой также уточняется на каждом шаге [93]. Это указывает на необходимость дальнейших исследований по сравнению методов EnKF и 4D-VAR в слабой формулировке.

Синтезом широкой дискуссии по сравнению методов 4D-VAR и EnKF [93–99] явилось признание необходимости разработки подходов к усвоению данных, сочетающих лучшие свойства методов 4D-VAR и EnKF [103]. Так появился подход Hybrid 4DVar, комбинирующий ансамблевый метод Калмана и вариационное усвоение данных, [100–104], а также ансамблевый метод четырехмерного вариационного усвоения данных 4DEnVar [105–110].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы привели обзор и анализ методов решения задач усвоения данных, разработанных в течение последних десятилетий. Развитие систем усвоения данных началось с метеорологии и диктовалось необходимостью улучшения прогнозов погоды. Помимо современных сложных метеорологических систем усвоения данных, эти методы находят все большее применение в океанографии и других областях.

Наряду с прогрессом в решении задач усвоения данных происходят качественные изменения систем измерений. Последние годы отмечены непрерывным ростом количества измерений различных характеристик нашей геосистемы. Поэтому создание технологий решения задач усвоения данных, основанных на современных подходах и учитывающих последние достижения в этом направлении, является актуальной проблемой.

Наиболее современными и эффективными являются методы вариационного усвоения данных, поэтому особое внимание следует уделить исследованиям в области численного решения задач вариационного усвоения данных наблюдений для проблем динамики океанов и морей. Слабая формулировка задачи вариационного усвоения данных позволяет учесть возможные ошибки модели и тем самым приводит к более точному результату решения задачи. Сформулированные в разделах 2 и 3 алгоритмы могут быть использованы для вычисления ковариационной матрицы ошибок оптимального решения и отдельных вкладов в нее, связанных с ошибками исходных данных. Эти алгоритмы дают возможность исследовать чувствительность оптимальных решений задач вариационного усвоения данных с использованием гессиана функционала стоимости.

Источник финансирования. Работа выполнена при частичной поддержке Российского научного фонда (проект проект 17-77-30001, в рамках которого проводились исследования в разделах 1–2, 4) и РФФИ (проект 18-01-00267, в рамках которого были проведены исследования в разделе 3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Richardson L.* Weather prediction by numerical process. Cambridge: Cambridge University Press, 1922.
2. *Charney J.G.* The use of the primitive equations of motion in numerical prediction // Tellus. 1955. V. 7. P. 22–26.
3. *Phillips N.A.* On the problem of initial data for the primitive equations // Tellus. 1960. V. 12. P. 121–126.
4. *Jazwinski A.H.* Stochastic Processes and Filtering Theory. London: Academic Press, 1970. 376 p.
5. *Bucy R.S., Joseph P.D.* Filtering for Stochastic Processes with Applications to Guidance (2nd ed.). Chelsea, New York, 1987. 217 p.
6. *Lions J.L.* Contrôle optimal des systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles. Paris: Dunod, 1968.
7. *Marchuk G.I.* Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. Kluwer, Dordrecht, 1995.
8. *Gill P.E., Murray W., Wright M.H.* Practical Optimization. London: Academic Press, 1987.
9. *Marchuk G.I., Agoshkov V.I., Shutyaev V.P.* Adjoint Equations and Perturbation Algorithms in Nonlinear Problems. New York: CRC Press Inc., 1996.
10. *Bennett A.F.* Inverse modeling of the ocean and atmosphere. Cambridge: Cambridge University Press, 2002.
11. *Daley R.* Atmospheric Data Analysis. Cambridge: Cambridge University Press, 1991. 457p.
12. *Ghil M., Malanotte-Rizzoli P.* Data assimilation in meteorology and oceanography. Adv. Geophys. 1991. 33. P. 141–266.
13. *Kalnay E.* Atmospheric Modeling. Data Assimilation and Predictibility. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.
14. *Panofsky H.* Objective weather-map analysis. J. Appl. Meteor. 1949. V. 6. P. 386–392.
15. *Gilchrist B., Cressman G.* An experiment in objective analysis // Tellus. 1954. V. 6. 309–318.
16. *Bergthorsson P., Doos B.* Numerical weather map analysis // Tellus. 1955. P. 329–340.
17. *Cressman G.* An operational objective analysis system // Mon. Wea. Rev. 1959. V. 87. P. 367–374.
18. *Hoke J., Anthes R.A.* The initialization of numerical models by a dynamic initialization technique // Mon. Weather Rev. 1976. V. 104. P. 1551–1556.
19. *Verron J.* Altimeter data assimilation into an ocean circulation model: sensitivity to orbital parameters, J. Geophys. Res. 1990. V. 95(C7) P. 443–459.
20. *Verron J., Holland W.R.* Impact de données d'altimétrie satellitaire sur les simulations numériques des circulations générales océaniques aux latitudes moyennes // Ann. Geophys. 1989. V. 7. P. 31–46.
21. *Blayo E., Verron J., Molines J.-M.* Assimilation of TOPEX/POSEIDON altimeter data into a circulation model of the North Atlantic // J. Geophys. Res. 1994. V. 99(C12). P. 24 691–24 705.
22. *Auroux D., Blum J.* A nudging-based data assimilation method: the Back and Forth Nudging (BFN) algorithm // Nonlin. Processes Geophys. 2008. V. 15. P. 305–319.
23. *Гандин Л.С.* Объективный анализ гидрометеорологических полей. Л.: Гидрометиздат, 1963.
24. *Lorenc A.C.* A global three-dimensional multivariate statistical analysis scheme // Mon. Wea. Rev. 1981. V. 109. P. 701–721.
25. *McPherson R.D., Bergman K.H., Kistler R.E., Rasch G.E., Gordon D.S.* The NMC operational global data assimilation system // Mon. Wea. Rev. 1979. V. 107. P. 1445–1461.
26. *Lyne W.H., Swinbank R., Birch N.T.* A data assimilation experiment, with results showing the atmospheric circulation during the FGGE special observing periods. Q. J. R. Meteorol. Soc. 1982. V. 108. P. 575–594.
27. *Lorenc A.C.* Analysis methods for numerical weather prediction. Q. J. R. Meteorol. Soc. 1986. V. 112. P. 1177–1194.
28. *Lorenc A.C., Bell R.S., Macpherson B.* The Meteorological Office analysis correction data assimilation scheme // Q. J. R. Meteorol. Soc. 1991. V. 117. P. 59–89.
29. *Thiebaux H.J., Pedder M.A.* Spatial Objective Analysis. London: Academic Press, 1987. 299 pp.
30. *Douville H., Viterbo P., Mahfouf J.-F., Beljaars A.C.M.* Evaluation of the optimum interpolation and nudging techniques for soil moisture analysis using FIFE Data // Mon. Wea. Rev. 2000. V. 128. P. 1733–1756.
31. *Багров А.Н., Цирульников М.Д.* Оперативная схема объективного анализа Гидрометцентра России // 70 лет Гидрометцентру России. СПб.: Гидрометеоиздат, 1999. С. 59–69.
32. *Фролов А.В., Важник А.И., Свиренко П.И., Цветков В.И.* Глобальная система усвоения данных наблюдений о состоянии атмосферы. СПб.: Гидрометеоиздат, 2000.
33. *Carton J.A., Hackert E.C.* Applications of multi-variate statistical objective analysis to the circulation in the tropical Atlantic // Ocean. Dyn. Atm. Oceans. 1989. V. 13. P. 491–515.
34. *Derber J.C., Rosati A.* A global ocean data assimilation system // J. Phys. Oceanogr. 1989. V. 19. P. 1333–1347.
35. *Smith S., Cummings J.A., Rowley C.* Validation Test Report for the Navy Coupled Ocean Data Assimilation 3D Variational Analysis (NCODA-VAR) System, Version 3.43. 2012.
36. *Evensen G.* The Ensemble Kalman filter: Theoretical formulation and practical implementation // Ocean Dynamics. 2003. V. 53(4). P. 343–367.
37. *Sakov P., Sandery P.A.* Comparison of EnOI and EnKF regional ocean reanalysis systems // Ocean Modelling. 2015. V. 89. P. 45–60.
38. *Кауркин М.Н., Ибраев Р.А., Беляев К.П.* Усвоение данных наблюдений в модели динамики океана

высокого пространственного разрешения с применением методов параллельного программирования // Океанология. 2016. Т. 56. № 6. С. 252–260.

39. *Kalman R.E.* A new approach to linear filter and prediction theory, J. Basic. Eng.-T. ASCE. 1960. V. 82. P. 35–45.
40. *Kalman R.E., Bucy R.S.* New results in linear filtering and prediction theory. ASME J. Basic. Eng. 1961. V. 83D. P. 95–108.
41. *Ghil M., Cohn S.E., Dalcher A.* Sequential estimation, data assimilation, and initialization. In: "The Interaction Between Objective Analysis and Initialization" (D. Williamson, ed.), Publ. Meteorol. 127 (Proc. 14th Stanstead Seminar). Montreal: McGill University, 1982. P. 83–97.
42. *Budgell N.P.* Stochastic filtering of linear shallow water wave processes. SIAM, J. Sci. Stat. Comput. 1986. C. 34–42.
43. *Саркисян А.С.* Моделирование динамики океана. СПб.: Гидрометеоиздат, 1991.
44. *Нелепо Б.А., Кныш В.В., Саркисян А.С., Тимченко И.Е.* Изучение синоптической изменчивости океана на основе динамико-стохастического подхода // Докл. АН СССР. 1979. 246. № 4. С. 974–978.
45. *Коротаев Г.К., Еремеев В.Н.* Введение в оперативную океанографию Черного моря. Севастополь: НПЦ ЭКОСИ-Гидрофизика, 2006. 382 с.
46. *Саркисян А.С., Демышев С.Г., Коротаев Г.К., Моисеенко В.А.* Пример четырехмерного анализа данных наблюдений программы "Разрезы" для Ньюфаундлендской ЭАЗО. Итоги науки и техники. Атмосфера, океан, космос – программа "Разрезы", т. 6. М.: ВИНИТИ, 1986. С. 88–89.
47. *Кныш В.В., Коротаев Г.К., Мизюк А.И., Саркисян А.С.* Усвоение гидрологических наблюдений для расчета течений в морях и океанах // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. 2012. Т. 48. № 1. С. 67–85.
48. *Evensen G.* Data Assimilation: The Ensemble Kalman Filter. Berlin: Springer, 2007.
49. *Klimova E.* A suboptimal data assimilation algorithm based on the ensemble Kalman filter. Q. J. R. Meteorol. Soc. 2012. V. 138. P. 2079–2085.
50. *Shlyaeva A.V., Tolstykh M.A., Mizyak V.G., Rogutov V.S.* Local ensemble transform Kalman filter data assimilation system for the global semi-Lagrangian atmospheric model // Russ. J. Num. An. & Math. Mod. 2013. V. 28. № 4. P. 419–441.
51. *Sasaki Y.K.* An objective analysis based on the variational method // J. Meteor. Soc. Japan. 1958. V. 36. P. 77–88.
52. *Sasaki Y.* Some basic formalisms in numerical variational analysis. Mon. Wea Rev. 1970. V. 98. P. 875–883.
53. *Provost C., Salmon R.* A variational method for inverting hydrographic data. J. Mar. Res. 1986. V. 44. P. 1–34.
54. *Пененко В.В., Образцов Н.В.* Вариационный метод для полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология. 1976. Т. 11. С. 1–11.
55. *Marchuk G.I., Penenko V.V.* Application of optimization methods to the problem of mathematical simulation of atmospheric processes and environment, in G.I. Marchuk (ed.), Modelling and Optimization of Complex Systems: Proc. Of the IFIP-TC7 Working conf. New York: Springer, 1978. P. 240–252.
56. *Le Dimet F.-X., Talagrand O.* Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: Theoretical Aspects // Tellus. 1986. V. 38A. P. 97–110.
57. *Lewis J.M., Derber J.C.* The use of adjoint equations to solve a variational adjustment problem with advective constraints // Tellus. 1985. V. 37A. P. 309–322.
58. *Courtier P., Talagrand O.* Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. II. Numerical results. Q. J. R. Meteorol. Soc. 1987. V. 111. P. 1329–1347.
59. *Navon I.M.* A review of variational and optimization methods in meteorology. In: Y.K. Sasaki (ed.) Variational Methods in Geosciences. New York: Elsevier, 1986. P. 29–34.
60. *Agoshkov V.I., Marchuk G.I.* On solvability and numerical solution of data assimilation problems. Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1993. V. 8. P. 1–16.
61. *Marchuk G.I., Zalesny V.B.* A numerical technique for geophysical data assimilation problem using Pontryagin's principle and splitting-up method. Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1993. V. 8. P. 311–326.
62. *Marchuk G.I., Shutyaev V.P.* Iteration methods for solving a data assimilation problem. Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1994. V. 9. P. 265–279.
63. *Марчук Г.И., Шутяев В.П.* Сопряженные уравнения и итерационные алгоритмы в задачах вариационного усвоения данных. Труды ИММ УрО РАН, 2011. Т. 17. № 2. С. 136–150.
64. *Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Zalesny V.B., Shutyaev V.P., Zakharova N.B., Gusev A.V.* Variational assimilation of observation data in the mathematical model of the Baltic Sea dynamics // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2015. V. 30. № 4. P. 203–212.
65. *Agoshkov V.I., Assovskii M., Zalesny V.B., Zakharova N.B., Parmuzin E.I., Shutyaev V.P.* Variational assimilation of observation data in the mathematical model of the Black Sea taking into account the tide-generating forces // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2015. V. 30. № 3. 129–142.
66. *Венцель М., Залесный В.Б.* Усвоение данных в одномерной модели конвекции-диффузии тепла в океане. Изв. АН. Физика атмосферы и океана. 1996. Т. 32. № 5. С. 613–629.
67. *Шутяев В.П.* Операторы управления и итерационные алгоритмы в задачах вариационного усвоения данных. М.: Наука, 2001.

68. *Агошков В.И., Пармузин Е.И., Шутяев В.П.* Численный алгоритм вариационной ассимиляции данных наблюдений о температуре поверхности океана. ЖВМ и МФ. 2008. Т. 48. № 8. С. 1371–1391.

69. *Parrish D.F., Derber J.C.* The National Meteorological Center's spectral statistical interpolation analysis scheme. Mon. Wea. Rev. 1992. V. 120. P. 1747–1763.

70. *Courtier P., Andersson E., Heckley W., Pailleux J., Vasiljevic D., Hamrud M., Hollingsworth A., Rabier F., Fisher M.* The ECMWF implementation of three-dimensional variational assimilation (3D-Var). I: Formulation. Quart. J. R. Meteorol. Soc. 1998. V. 124. P. 1783–1807.

71. *Courtier P., Thepaut J.N., Hollingsworth A.* A strategy for operational implementation of 4D-Var, using an incremental approach. Quart. J. R. Meteorol. Soc. 1994. V. 120. P. 1389–1408.

72. *Ide K., Courtier P., Ghil M., Lorenc A.C.* Unified notation for data assimilation: Operational, sequential and variational. J. Met. Soc. Japan. 1997. V. 75. P. 181–189.

73. *Mogensen K., Balmaseda M.A., Weaver A.T., Martin M., Vidard A.* NEMOVAR: a variational data assimilation system for the NEMO ocean model, ECMWF Technical Memorandum. 2009. Number 120.

74. *Евтушенко Ю.Г., Засухина Е.С., Зубов В.И.* О численном подходе к оптимизации решения задачи Бюргерса с помощью граничных условий. ЖВМ и МФ. 1997. Т. 2. № 12. С. 1449–1458.

75. *Ипатова В.М.* Задача усвоения данных для модели общей циркуляции океана в квазигеострофическом приближении. Деп. в ВИНИТИ № 2333-В92. М., 1992.

76. *Агошков В.И., Ипатова В.М.* Разрешимость задачи усвоения данных наблюдений в трехмерной модели динамики океана. Дифференциальные уравнения. 2007. Т. 43. № 8. С. 1064–1075.

77. *Агошков В.И., Ипатова В.М.* Теоремы существования для трехмерной модели динамики океана и задачи ассимиляции данных // ДАН. 2007. Т. 412. № 2. С. 151–153.

78. *Sirkes Z., Tziperman E.* Finite difference of adjoint or adjoint of finite difference? Mon. Weather Rev. 1997. V. 125. P. 3373–3378.

79. *Parmuzin E.I., Shutyaev V.P., Diansky N.A.* Numerical solution of a variational data assimilation problem for a 3D ocean thermohydrodynamics model with a nonlinear vertical heat exchange // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2007. V. 22 (2). P. 177–198.

80. *Le Dimet F.-X., Charpentier I.* Methodes de second order en assimilation de donnees. Equations aux Derivees Partielles et Applications (Articles dediees a Jacques-Louis Lions). Paris: Elsevier, 1998. P. 623–639.

81. *Lawless A.S., Nichols N.K., Balloid S.P.* A comparison of two methods for developing the linearization of a shallow-water model. Q. J. R. M. S. 2003. V. 129. P. 1237–1254.

82. *Chao W.C., Chang L.-P.* Development of a four-dimensional variational analysis system using the adjoint method at GLA. Part I: Dynamics. Mon. Weather Rev. 1992. V. 120. P. 1661–1672.

83. *Giering R., Kaminski T.* Recipes for adjoint code constructions. ACM Trans. Math. Software. 1998. V. 24. P. 437–474.

84. *Giles M.B., Pierce N.A.* An introduction to the adjoint approach to design. Flow, Turbul. Combust. 2000. V. 65. P. 393–415.

85. *Le Dimet F.-X., Shutyaev V.P.* On deterministic error analysis in variational data assimilation // Nonlinear Processes in Geophysics. 2005. V. 12. P. 481–490.

86. *Gejadze I., Le Dimet F.-X., Shutyaev V.* On analysis error covariances in variational data assimilation. SIAM Journal on Scientific Computing. 2008. V. 30. № 4. P. 1847–1874.

87. *Shutyaev V.P., Parmuzin E.I.* Some algorithms for studying solution sensitivity in the problem of variational assimilation of observation data for a model of ocean thermodynamics // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2009. V. 24. № 2. P. 145–160.

88. *Агошков В.И., Пармузин Е.И., Шутяев В.П.* Ассимиляция данных наблюдений в задаче циркуляции Черного моря и анализ чувствительности ее решения // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2013. Т. 49. № 6. С. 643–654.

89. *Шутяев В.П., Ле Диме Ф., Агошков В.И., Пармузин Е.И.* Чувствительность функционалов задач вариационного усвоения данных наблюдений // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2015. Т. 51. № 3. С. 392–400.

90. *Шутяев В.П., Пармузин Е.И.* Исследование чувствительности оптимального решения задачи вариационного усвоения данных для модели термодинамики Балтийского моря // Метеорология и гидрология. 2015. № 6. С. 88–97.

91. *Le Dimet F.-X., Shutyaev V., Parmuzin E.I.* Sensitivity of functionals with respect to observations in variational data assimilation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2016. V. 31. № 2. P. 81–91.

92. *Залесный В.Б., Агошков В.И., Шутяев В.П., Ле Диме Ф., Ивченко В.О.* Задачи численного моделирования гидродинамики океана с вариационной ассимиляцией данных наблюдений // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2016. Т. 52. № 4. С. 488–500.

93. *Lorenc A.* The potential of the ensemble Kalman filter for NWP – a comparison with 4D-Var, Q. J. Roy. Meteorol. Soc. 2003. V. 129. P. 3183–3203.

94. *Kalnay E., Li H., Miyoshi T., Yang S.-C., Ballabrera-Poy J.* 4D-Var or Ensemble Kalman Filter? // Tellus. 2007. V. A 59. P. 758–773.

95. *Caya A., Sun J., Snyder C.* A Comparison between the 4DVAR and the ensemble Kalman filter techniques for radar data assimilation. Monthly Weather Review. 2005. V. 133(11). P. 3081–3094.

96. *Gustafsson N.* Discussion on "4D-Var or EnKF" // Tellus A. 2007. V. 59. P. 774–777.
97. *Fertig E.J., Harlim J., Hunt B.R.* A Comparative Study of 4D-VAR and a 4D Ensemble Kalman Filter: Perfect Model Simulations with Lorenz-96 // Tellus. 2007. V. 59A. P. 96–100.
98. *Buehner M., Houtekamer P., Charette C., Mitchell H., He B.* Intercomparison of variational data assimilation and the ensemble Kalman filter for global deterministic NWP. Part I: Description and single-observation experiments, Mon. Weather Rev. 2010. V. 138. P. 1550–1566.
99. *Fairbairn D., Pring S.R., Lorenc A.C., Roulstone I.* A comparison of 4DVar with ensemble data assimilation methods. Q. J. Roy. Meteor. Soc. 2014. V. 140. P. 281–294.
100. *Tian X., Xie J., Dai A.* An ensemble-based explicit 4D-Var assimilation method // Journal of Geophysical Research. 2008. V. 113 (D21124).
101. *Zhang F.Q., Zhang M., Hansen J.A.* Coupling ensemble Kalman filter with four dimensional variational data assimilation // Adv. Atmos. Sci. 2009. V. 26 (1). P. 1–8.
102. *Clayton A.M., Lorenc A.C., Barker D.M.* Operational implementation of a hybrid ensemble/4D-Var global data assimilation at the Met Office // Q. J. R. Meteorol. Soc. 2013. V. 139. P. 1445–1461.
103. *Gustafsson N., Bojarova J., Vignes O.* A hybrid variational ensemble data assimilation for the HIgh Resolution Limited Area Model (HIRLAM), Nonlin. Processes Geophys. 2014. V. 21. P. 303–323.
104. *Bonavita M., Hólm E., Isaksen L., Fisher M.* The evolution of the ECMWF hybrid data assimilation system // Q. J. R. Meteorol. Soc. 2016. V. 142. P. 287–303.
105. *Liu C., Xiao Q., Wang B.* An ensemble-based four-dimensional variational data assimilation scheme. Part I: Technical formulation and preliminary test // Mon. Weather Rev. 2008. V. 136. P. 3363–3373.
106. *Liu C., Xiao Q., Wang B.* An ensemble-based four-dimensional variational data assimilation scheme. Part II: Observing system simulation experiments with advanced research WRF (ARW) // Mon. Weather Rev. 2009. V. 137. P. 1687–1704.
107. *Liu C., Xiao Q.* An ensemble-based four-dimensional variational data assimilation scheme. Part III: Antarctic applications with advanced WRF using real data // Mon. Weather Rev. 2013. V. 141. P. 2721–2739.
108. *Desroziers G., Camino J.-T., Berre L.* 4DEnVar: link with 4D state formulation of variational assimilation and different possible implementations // Q. J. Roy. Meteorol. Soc. 2014. V. 140. P. 2097–2110.
109. *Gustafsson N., Bojarova J.* Four-dimensional ensemble variational (4D-En-Var) data assimilation for the HIgh Resolution Limited Area Model (HIRLAM). Nonlin. Processes Geophys. 2014. V. 21. P. 745–762.
110. *Asch M., Bocquet M., Nodet M.* Data Assimilation: Methods, Algorithms, and Applications. Philadelphia, SIAM, 2016.
111. *Gejadze I., Le Dimet F.-X., Shutyaev V.P.* On optimal solution error covariances in variational data assimilation problems // J. Comp. Phys. (2010). V. 229. P. 2159–2178.
112. *Gejadze I., Shutyaev V.P., Le Dimet F.-X.* Analysis error covariance versus posterior covariance in variational data assimilation // Q. J. R. Meteorol. Soc. 2013. V. 139. P. 1826–1841.
113. *Gejadze I.Yu., Shutyaev V.P.* On gauss-verifiability of optimal solutions in variational data assimilation problems with nonlinear dynamics // J. Comput. Phys. 2015. V. 280. P. 439–456.
114. *Liu D.C., Nocedal J.* On the limited memory BFGS method for large scale minimization // Math. Program. 1989. V. 45. P. 503–528.
115. *Veerse F., Auroux D., Fisher M.* Limited-memory BFGS diagonal pre-conditioners for a data assimilation problem in meterology // Optim. Eng. 2000. V. 1. P. 323–339.
116. *Trémolet Y.* Model-error estimation in 4D-Var // Q. J. R. Meteorol. Soc. 2007. V. 133(626). P. 1267–1280.
117. *Carrassi A., Vannitsem S.* Accounting for model error in variational data assimilation: a deterministic approach // Monthly Weather Review. 2010. V. 138. P. 875–883.
118. *Furbish D., Hussaini M.Y., Le Dimet F.-X., et al.* On discretization error and its control in variational data assimilation // Tellus. 2008. V. 60A. P. 979–991.
119. *Griffith A.K., Nichols N.K.* Adjoint methods in data assimilation for estimating model error // Flow, Turbul. Combust. 2000. V. 65(3/4). P. 469–488.
120. *Vidard A., Piacentini A., Le Dimet F.-X.* Variational data analysis with control of the forecast bias // Tellus, 2004. V. A56. P. 1–12.
121. *Akella S., Navon I.* Different approaches to model error formulation in 4D-Var: a study with high resolution advection schemes // Tellus. 2009. V. 61A. P. 112–128.
122. *Пененко В.В.* Вариационные методы усвоения данных и обратные задачи для изучения атмосферы, океана и окружающей среды // Сиб. журн. вычисл. математики. 2009. Т. 12. С. 421–434.
123. *Tsyrulnikov M.D.* 2005. Stochastic modelling of model errors: a simulation study. Q. J. R. Meteorol. Soc. 2005. V. 131. P. 3345–3371.
124. *Gejadze I., Oubanas H., Shutyaev V.* Implicit treatment of model error using inflated observation-error covariance // Q. J. R. Meteorol. Soc. 2017. V. 143. P. 2496–2508.
125. *Shutyaev V., Gejadze I., Vidard A., Le Dimet F.-X.* Optimal solution error quantification in variational data assimilation involving imperfect models // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2017. V. 83. № 3. P. 276–290.
126. *Stuart A. M.* Inverse problems: a Bayesian perspective // Acta Numerica. 2010. V. 9. P. 451–559.

Methods for Assimilation of Observational Data in Problems of the Physics of the Atmosphere and the Ocean

V.P. Shutyaev

Marchuk Institute of Numerical Mathematics, RAS
Gubkina ul., 8, Moscow, 119333, Russia
Federal State Budget Scientific Institution "Marine Hydrophysical Institute, RAS"
Kapitanskaya ul., 2, Sevastopol, 299011, Russia
E-mail: victor.shutyaev@mail.ru

Received: 14.06.2018
Revised version received: 25.07.2018

In this paper we review and analyze approaches to data assimilation in geophysical hydrodynamics problems, starting with the simplest successive schemes of assimilation and ending with modern variational methods. Special attention is paid to the the study of the problem of variational assimilation in the weak formulation and construction of covariance error matrices of the optimal solution. This is a new direction, to which the author made a contribution: an optimality system is formulated for the problem of variational data assimilation in a weak formulation and algorithms for deriving the covariance error matrices of the optimal solution are developed.

Keywords: data assimilation, variational problem, optimal solution, weak formulation, covariance matrix