ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2019, том 486, № 4, с. 421–425

МАТЕМАТИКА

УДК 519.6

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ФУНКЦИОНАЛОВ ЗАДАЧ ВАРИАЦИОННОГО УСВОЕНИЯ ДАННЫХ

В. П. Шутяев[1,*], Ф. Ле Диме[2]

Представлено академиком РАН В.П. Дымниковым 28.02.2019 г.

Поступило 04.03.2019 г.

Задача вариационного усвоения данных для нелинейной эволюционной модели сформулирована как задача оптимального управления для нахождения одновременно неизвестных параметров и начального состояния модели. Функция отклика рассматривается как функционал от оптимального решения, найденного в результате ассимиляции. Исследована чувствительность функционала к данным наблюдений. Градиент функционала относительно наблюдений связан с решением нестандартной задачи, включающей систему прямых и сопряжённых уравнений. На основе гессиана исходной функции стоимости изучается разрешимость нестандартной задачи. Сформулирован и обоснован алгоритм вычисления градиента функции отклика относительно данных наблюдений.

Ключевые слова: вариационное усвоение данных, оптимальное управление, чувствительность функционалов, гессиан.

DOI: https://doi.org/10.31857/S0869-56524864421-425

В настоящее время методы вариационного усвоения данных наблюдений стали универсальным и перспективным инструментом для решения задач мониторинга и анализа состояния природной среды с целью исследования глобальных изменений (см., например, [1–5]). Задачи вариационного усвоения данных могут быть сформулированы как задачи оптимального управления для поиска неизвестных параметров модели (начальные и граничные условия, источники, распределённые коэффициенты и т.п.) на основе минимизации функции стоимости, связанной с наблюдениями. Необходимое условие оптимальности сводит задачу оптимального управления к системе оптимальности, которая включает в себя уравнения модели, сопряжённую задачу и функции входных данных. Оптимальное решение зависит от данных наблюдений, которые могут содержать неопределённости, и для прогнозов очень важно исследовать чувствительность оптимального решения и его функционалов по отношению к ошибкам наблюдений.

Первые исследования чувствительности функций отклика после ассимиляции по отношению к параметрам модели были выполнены в [6] с использованием сопряжённых уравнений второго порядка для вариационной задачи ассимиляции данных с целью восстановления начального состояния. Уравнения для расчёта чувствительности прогноза к наблюдениям в четырёхмерной (4D-Var) ассимиляции данных были получены в [7] для конечномерного случая.

Чувствительность оптимального решения задач вариационного усвоения данных связана с его статистическими свойствами (см. [8–11]). В последние годы растёт интерес к совместной оценке начального состояния и параметров с использованием 4D-Var (см., например, [12]). В настоящем сообщении обобщены результаты авторов [13, 14] и представлен анализ чувствительности функционалов к ошибкам наблюдений при вариационном усвоении данных с целью одновременного восстановления неизвестных параметров и начального состояния динамической модели.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим математическую модель физического процесса, описываемого с помощью нелинейной эволюционной задачи вида

[1]*Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука Российской Академии наук, Москва*

[2]*Université de Grenoble Alpes, Domaine Universitaire de Saint-Martin-d'Hères, France*

**E-mail: victor.shutyaev@mail.ru*

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \varphi}{\partial t} = F(\varphi, \lambda) + f, \quad t \in (0, T) \\ &\varphi|_{t=0} = u, \end{aligned} \tag{1}$$

где $u \in X$ — начальное состояние, X — гильбертово пространство, неизвестная функция $\varphi = \varphi(t)$ принадлежит $Y = L_2(0, T; X)$ с нормой $\|\varphi\|_Y = (\varphi, \varphi)_Y^{1/2} = (\int\limits_0^T \|\varphi(t)\|_X^2 \, dt)^{1/2}$, $F\colon Y \times Y_p \to Y$ — нелинейный оператор, Y_p — гильбертово пространство (пространство параметров модели), $f \in Y$. Предполагаем, что при заданных $u \in X, f \in Y$ и $\lambda \in Y_p$ существует единственное решение $\varphi \in Y$ задачи (1) такое, что $\frac{\partial \varphi}{\partial t} \in Y$. В дальнейшем функции параметров модели λ и начального состояния u будем считать неизвестными.

Введём функцию стоимости как функционал на $X \times Y_p$ в виде

$$\begin{aligned} J(u, \lambda) = \frac{1}{2}\|V_1^{1/2}(u - u_b)\|_X^2 + \frac{1}{2}\|V_2^{1/2}(\lambda - \lambda_b)\|_{Y_p}^2 + \\ + \frac{1}{2}\|V_3^{1/2}(C\varphi - \varphi_{\text{obs}})\|_{Y_{\text{obs}}}^2, \end{aligned} \tag{2}$$

где $u_b \in X$, $\lambda_b \in Y_p$ — функции начального приближения, $\varphi_{\text{obs}} \in Y_{\text{obs}}$ — функция данных наблюдений, Y_{obs} — гильбертово пространство наблюдений, $C\colon Y \to Y_{\text{obs}}$ — линейный ограниченный оператор наблюдений, $V_1\colon X \to X, V_2\colon Y_p \to Y_p$ и $V_3\colon Y_{\text{obs}} \to Y_{\text{obs}}$ — симметричные положительно определённые ограниченные операторы.

Рассмотрим следующую задачу об усвоении данных наблюдений с целью отыскания начального значения u и параметра λ: при заданных $f \in Y, \varphi_{\text{obs}} \in Y_{\text{obs}}$, $u_b \in X$, $\lambda_b \in Y_p$ найти $u \in X, \lambda \in Y_p$ и $\varphi \in Y$ такие, что выполнено (1), и на множестве решений (1) функционал $J(u, \lambda)$ достигает наименьшего значения, т.е.

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \varphi}{\partial t} = F(\varphi, \lambda) + f, \; t \in (0, T), \\ &\varphi|_{t=0} = u, \\ &J(u, \lambda) = \inf_{w \in X, v \in Y_p} J(w, v). \end{aligned} \tag{3}$$

В предположении существования решения задачи (3), необходимое условие оптимальности приводит к системе оптимальности [1, 2, 15]:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \varphi}{\partial t} = F(\varphi, \lambda) + f, \quad t \in (0, T), \\ &\varphi|_{t=0} = u, \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \varphi^*}{\partial t} + (F'_\varphi(\varphi, \lambda))^* \varphi^* = C^* V_3 (C\varphi - \varphi_{\text{obs}}), \; t \in (0, T) \\ &\varphi^*|_{t=T} = 0; \end{aligned} \tag{5}$$

$$V_1(u - u_b) - \varphi^*|_{t=0} = 0, \tag{6}$$

$$V_2(\lambda - \lambda_b) - (F'_\lambda(\varphi, \lambda))^* \varphi^* = 0. \tag{7}$$

Здесь $F'_\varphi(\varphi, \lambda)\colon Y \to Y, F'_\lambda(\varphi, \lambda)\colon Y_p \to Y$ — производные Фреше от F по φ и λ, соответственно, а C^* — оператор, сопряжённый к C и определяемый равенством $(C\varphi, \psi)_{Y_{\text{obs}}} = (\varphi, C^*\psi)_Y$, $\varphi \in Y, \psi \in Y_{\text{obs}}$.

Предположим, что система оптимальности (4)–(7) имеет единственное решение $\varphi, \varphi^* \in Y, u \in X, \lambda \in Y_p$,, и исследуем чувствительность функционалов от оптимального решения по отношению к ошибкам данных наблюдений φ_{obs}.

2. ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ФУНКЦИОНАЛОВ К ДАННЫМ НАБЛЮДЕНИЙ

Во многих приложениях данные наблюдений известны с погрешностями, и поэтому важно оценить влияние неопределённостей в наблюдениях на результаты модели после ассимиляции. Интерес представляют функции отклика как функционалы от оптимального решения.

Введём функцию отклика $G(\varphi, u, \lambda)$, которая предполагается вещественнозначной и может рассматриваться как функционал на $Z = Y \times X \times Y_p$. Нас интересует чувствительность G по отношению к φ_{obs} после того, как φ, u и λ получены из системы оптимальности (4)–(7). Чувствительность определяется градиентом функционала G по φ_{obs}:

$$\frac{dG}{d\varphi_{\text{obs}}} = \frac{\partial G}{\partial \varphi}\frac{\partial \varphi}{\partial \varphi_{\text{obs}}} + \frac{\partial G}{\partial \lambda}\frac{\partial \lambda}{\partial \varphi_{\text{obs}}} + \frac{\partial G}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial \varphi_{\text{obs}}}, \tag{8}$$

где $\frac{\partial G}{\partial \varphi}\colon Z \to Y$, $\frac{\partial G}{\partial \lambda}\colon Z \to Y_p$, $\frac{\partial G}{\partial u}\colon Z \to X$, $\frac{\partial \varphi}{\partial \varphi_{\text{obs}}}$, $\frac{\partial \lambda}{\partial \varphi_{\text{obs}}}$, $\frac{\partial u}{\partial \varphi_{\text{obs}}}$ — производные Гато от φ, λ, u по φ_{obs}.

Пусть $\delta\varphi_{\text{obs}}$ — вариация φ_{obs}, тогда получаем из (4)–(7) систему в вариациях:

$$\frac{\partial\delta\varphi}{\partial t} = F_\varphi(\varphi,\lambda)\delta\varphi + F_\lambda(\varphi,\lambda)\delta\lambda, \quad t\in(0,T), \qquad (9)$$
$$\delta\varphi|_{t=0} = \delta u;$$

$$-\frac{\partial\delta\varphi^*}{\partial t} - (F'_\varphi(\varphi,\lambda))^*\delta\varphi^* - (F''_{\varphi\varphi}(\varphi,\lambda)\delta\varphi)^*\varphi^* =$$
$$= (F''_{\varphi\lambda}(\varphi,\lambda)\delta\lambda)^*\varphi^* - C^*V_3(C\delta\varphi - \delta\varphi_{\rm obs}),$$
$$\delta\varphi^*|_{t=T} = 0; \qquad (10)$$

$$V_1\delta u - \delta\varphi^*|_{t=0} = 0, \qquad (11)$$

$$V_2\delta\lambda - (F''_{\lambda\varphi}(\varphi,\lambda)\delta\varphi)^*\varphi^* - (F''_{\lambda\lambda}(\varphi,\lambda)\delta\lambda)^*\varphi^* -$$
$$-(F'_\lambda(\varphi,\lambda))^*\delta\varphi^* = 0, \qquad (12)$$

$$\left(\frac{dG}{d\varphi_{\rm obs}}, \delta\varphi_{\rm obs}\right)_{Y_{\rm obs}} =$$
$$= \left(\frac{\partial G}{\partial\varphi}, \delta\varphi\right)_Y + \left(\frac{\partial G}{\partial\lambda}, \delta\lambda\right)_{Y_p} + \left(\frac{\partial G}{\partial u}, \delta u\right)_X, \qquad (13)$$

где $\delta\varphi$, $\delta\varphi^*$, $\delta\lambda, \delta u$ — решение (9)–(12).

Теорема 1. *Пусть* $P_1, P_2 \in Y, P_3 \in Y_p, P_4 \in X$ — *решения следующей системы уравнений*:

$$-\frac{\partial P_1}{\partial t} - (F'_\varphi(\varphi,\lambda))^* P_1 - (F''_{\varphi\varphi}(\varphi,\lambda)P_2)^*\varphi^* =$$
$$= (F''_{\lambda\varphi}(\varphi,\lambda)P_3)^*\varphi^* - C^*V_3CP_2 + \frac{\partial G}{\partial\varphi}, \qquad (14)$$
$$P_1|_{t=T} = 0;$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} - F'_\varphi(\varphi,\lambda)P_2 - F'_\lambda(\varphi,\lambda)P_3 = 0, \ t\in(0,T),$$
$$P_2|_{t=0} - P_4 = 0; \qquad (15)$$

$$V_1P_4 - P_1|_{t=0} = \frac{\partial G}{\partial u}, \qquad (16)$$

$$V_2P_3 - (F''_{\varphi\lambda}(\varphi,\lambda)P_2)^*\varphi^* - (F''_{\lambda\lambda}(\varphi,\lambda)P_3)^*\varphi^* -$$
$$-(F'_\lambda(\varphi,\lambda))^*P_1 = \frac{\partial G}{\partial\lambda}, \qquad (17)$$

где $\varphi, \varphi^* \in Y, u\in X, \lambda\in Y_p$ — *решение системы оптимальности* (4)–(7). *Тогда градиент функционала G по* $\varphi_{\rm obs}$ *определяется по формуле*

$$\frac{dG}{d\varphi_{\rm obs}} = V_3CP_2. \qquad (18)$$

Мы получаем связанную систему двух дифференциальных уравнений (14) и (15) первого порядка по времени с дополнительными условиями (16), (17). Для исследования этой нестандартной задачи (14)–(17) с взаимозависимыми начальными условиями для P_1, P_2, мы сводим её к одному операторному уравнению, включающему гессиан исходной функции стоимости.

Введём оператор управления [15] $\mathcal{H}: X\times Y_p \to X\times Y_p$, определенный на $U = (w,v)^T \in X\times Y_p$ последовательным решением следующих задач:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} - F'_\varphi(\varphi,\lambda)\phi = F'_\lambda(\varphi,\lambda)v, \quad t\in(0,T),$$
$$\phi|_{t=0} = w; \qquad (19)$$

$$-\frac{\partial\phi^*}{\partial t} - (F'_\varphi(\varphi,\lambda))^*\phi^* - (F''_{\varphi\varphi}(\varphi,\lambda)\phi)^*\varphi^* =$$
$$= (F''_{\lambda\varphi}(\varphi,\lambda)w)^*\varphi^* - C^*V_3C\phi,$$
$$\phi^*|_{t=T} = 0; \qquad (20)$$

$$\mathcal{H}U = (V_1w - \phi^*|_{t=0}, V_2v - (F''_{\varphi\lambda}(\varphi,\lambda)\phi)^*\varphi^* -$$
$$-(F''_{\lambda\lambda}(\varphi,\lambda)w)^*\varphi^* - (F'_\lambda(\varphi,\lambda))^*\phi^*)^T, \qquad (21)$$

где λ, u, φ, φ^* — решение системы оптимальности (4)–(7). Нетрудно убедиться [15] в том, что (14)–(17) эквивалентна следующему уравнению в $X\times Y_p$:

$$\mathcal{H}U = \mathcal{F} \qquad (22)$$

с некоторой $\mathcal{F}\in X\times Y_p$.

Легко видеть, что оператор $\mathcal{H}$, определённый равенствами (19)–(21), является гессианом исходного функционала J, рассматриваемого на оптимальном решении u, λ задачи (4)–(7): $J''(u,\lambda) = \mathcal{H}$. В предположении, что $\mathcal{H}$ положительно определён, уравнение (22) корректно и везде разрешимо в $X\times Y_p$, т.е. для каждого $\mathcal{F}\in X\times Y_p$ существует единственное решение $U\in X\times Y_p$ и справедлива априорная оценка

$$\|U\|_{X\times Y_p} \le c\|\mathcal{F}\|_{X\times Y_p}, \ c = {\rm const} > 0.$$

Таким образом, исследование разрешимости нестандартной задачи (14)–(17) сводится к исследованию уравнения (22).

Т е о р е м а 2. *Градиент функционала G определяется последовательным выполнением шагов*:

1) *для* $\frac{\partial G}{\partial \lambda} \in Y_p$, $\frac{\partial G}{\partial \varphi} \in Y$, $\frac{\partial G}{\partial u} \in X$ *решаем сопряжённую задачу*

$$-\frac{\partial \tilde{\phi}^*}{\partial t} - (F'_\varphi(\varphi,\lambda))^* \tilde{\phi}^* = \frac{\partial G}{\partial \varphi}, \quad t \in (0,T),$$
$$\tilde{\phi}^*|_{t=T} = 0 \qquad (23)$$

и полагаем

$$\mathcal{F} = \left(\frac{\partial G}{\partial u} + \tilde{\phi}^*|_{t=0}, \frac{\partial G}{\partial \lambda} + (F'_\lambda(\varphi,\lambda))^* \tilde{\phi}^* \right)^T.$$

2) *находим* $U = (w, v)^T$ *как решение уравнения*

$$\mathcal{H} U = \mathcal{F}$$

с гессианом функции стоимости J, определённым равенствами (19)–(21);

3) *для* $U = (w, v)^T$ *решаем прямую задачу*

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} - F'_\varphi(\varphi,\lambda) P_2 = F'_\lambda(\varphi,\lambda) v, \ t \in (0,T),$$
$$P_2|_{t=0} = w; \qquad (24)$$

4) *вычисляем градиент по формуле*

$$\frac{dG}{d\varphi_{\text{obs}}} = V_3 C P_2. \qquad (25)$$

Последняя формула позволяет оценить чувствительность функций отклика, связанных с оптимальным решением после ассимиляции, по отношению к данным наблюдений. Численный анализ алгоритма в случае оценки параметров проведён в [14] для задачи вариационного усвоения данных в модели термодинимики Балтийского моря.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложен численный алгоритм для исследования чувствительности функционалов от оптимального решения задачи вариационного усвоения данных с целью восстановления неизвестных параметров и начального состояния модели. Оптимальное решение, полученное в результате ассимиляции, зависит от наблюдений, которые могут содержать погрешности. Вычисление градиента функционалов по наблюдениям сводится к решению нестандартной задачи, которая представляет собой систему, включающую прямые и сопряжённые уравнения с взаимозависимыми переменными. Разрешимость нестандартной задачи связана со свойствами гессиана исходной функции стоимости. Разработан алгоритм вычисления градиента функции отклика. Представленный алгоритм может быть использован для определения подобластей, в которых функции отклика оптимального решения наиболее чувствительны к ошибкам в наблюдениях при вариационном усвоении данных.

Источники финансирования. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19–71–20035, в рамках которого проводились исследования в разделе 2) и РФФИ (проект 18–01–00267, в рамках которого были проведены численные расчёты).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Marchuk G.I.* Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. Dordrecht: Kluwer, 1995.
2. *Lions J.-L.* Contrôle Optimal des Systèmes Gouvernés par des Équations aux Dérivées Partielles. Paris: Dunod, 1968.
3. *Пененко В.В., Образцов Н.Н.* Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология. 1976. № 11. С. 1–11.
4. *Le Dimet F.-X., Talagrand O.* Variational Algorithms for Analysis and Assimilation of Meteorological Observations: Theoretical Aspects // Tellus. 1986. 38A. P. 97–110.
5. *Marchuk G.I., Agoshkov V.I., Shutyaev V.P.* Adjoint Equations and Perturbation Algorithms in Nonlinear Problems. N.Y.: CRC Press Inc., 1996.
6. *Le Dimet F.-X., Ngodock H.E., Luong B., Verron J.* Sensitivity Analysis in Variational Data Assimilation // J. Meteorol. Soc. Jap. 1997. V. 75. № 1B. P. 245–255.
7. *Daescu D.N.* On the Sensitivity Equations of Four-Dimensional Variational (4D-Var) Data Assimilation // Mon.Weather Rev. 2008. V. 136. № 8. P. 3050–3065.
8. *Gejadze I., Le Dimet F.-X., Shutyaev V.* On Analysis Error Covariances in Variational Data Assimilation // SIAM J. Sci. Computing. 2008. V. 30. № 4. P. 1847–1874.
9. *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. № 6. P. 2159–2178.
10. *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.

11. *Gejadze I.Yu., 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.
12. *Smith P. J., Thornhill G.D., Dance S.L., Lawless A.S., Mason D.C., Nichols N.K.* Data Assimilation for State and Parameter Estimation: Application to Morphodynamic Modelling // Q.J.R. Meteorol. Soc. 2013. V. 139. P. 314–327.
13. *Shutyaev V., Le Dimet F.-X., Shubina E.* Sensitivity with Respect to Observations in Variational Data Assimilation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling, 2017. V. 32. № 1. P. 61–71.
14. *Shutyaev V. P., Le Dimet F.-X., Parmuzin E.I.* Sensitivity Analysis with Respect to Observations in Variational Data Assimilation for Parameter Estimation // Nonlin. Processes Geophys. 2018. V. 25. P. 429–439.
15. *Шутяев В.П.* Операторы управления и итерационные алгоритмы в задачах вариационного усвоения данных. М.: Наука, 2001. 239 с.

SENSITIVITY OF FUNCTIONALS OF VARIATIONAL DATA ASSIMILATION PROBLEMS

V. P. Shutyaev[1], F.-X. Le Dimet[2]

[1]*Marchuk Institute of Numerical Mathematics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

[2]*Université de Grenoble Alpes,Domaine Universitaire de Saint-Martin-d'Hères, France*

Presented by Academician of the RAS V.P. Dymnikov February 28, 2019

Received March 4, 2019

The problem of variational data assimilation for a nonlinear evolutionary model is formulated as an optimal control problem to find simultaneously unknown parameters and the initial state of the model. The response function is considered as a functional of the optimal solution found as a result of assimilation. The sensitivity of the functional to observational data is studied. The gradient of the functional with respect to observations is associated with the solution of a nonstandard problem involving a system of direct and adjoint equations. On the basis of the Hessian of the original cost function, the solvability of the nonstandard problem is studied. An algorithm for calculating the gradient of the response function with respect to observational data is formulated and justified.

Keywords: variational data assimilation, optimal control, sensitivity of functionals, Hessian.