

Assimilation variationnelle avec un modèle spectral

Etude de l'équation de Burgers

Jean-François Mahfouf

Mai 2025

1. Introduction

Je présente dans cette note quelques résultats d'une assimilation de données variationnelle avec un modèle jouet unidimensionnel de type advection-diffusion : l'équation de Burgers. Cette équation a été étudiée dans un contexte de type "assimilation de données" par divers auteurs :

- Développement d'un filtre de Kalman Etendu (Ménard, 1994)
- Comparaison de diverses méthodes d'estimation de la matrice de covariances d'erreurs d'analyse (Fisher and Courtier, 1995)
- Comparaison de diverses méthodes d'assimilation de données, comme l'EKF, le 3D-Var et le 4D-Var (Rabier and Liu, 2003)
- Comparaison de méthodes d'assimilation de données variationnelles dans un cadre ensembliste (Desroziers et al., 2014)

Dans tous les exemples cités, la méthode spectrale est utilisée pour la résolution numérique du modèle pronostique. De manière similaire, le problème d'assimilation de données est résolu dans l'espace spectral. Ceci conduit à des spécificités par rapport à un traitement dans l'espace physique mais elle sont très peu discutées par les auteurs des articles ci-dessus. Je propose donc de décrire dans cette note l'ensemble des étapes nécessaires à la résolution un problème d'assimilation variationnelle dans l'espace spectral en utilisant un modèle spectral pour propager les variables pronostiques dans le temps.

2. Modèle dynamique

Je considère l'équation de Burgers unidimensionnelle suivante, pour la vitesse d'un vent zonal u :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

Tout d'abord, le terme d'advection est réécrit sous forme de flux :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2)$$

La discrétisation temporelle la plus simple est un schéma de type Euler "Forward" pour l'advection¹ et "Backward" (i.e. implicite) pour la diffusion :

$$\frac{u^{t+1} - u^t}{\Delta t} = - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{u^2}{2} \right) \right]^t + \left[\nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right]^{t+1} \quad (3)$$

Le domaine est périodique de longueur $2\pi a$ (où a est le rayon associé à un cercle de latitude). On décompose le champ u en série de Fourier avec $(2M+1)$ coefficients u_m (où M est la troncature spectrale choisie) :

$$u(x, t) = \sum_{m=-M}^M u_m(t) e^{ims/a} \quad (4)$$

Ainsi, l'équation précédente s'écrit pour chaque coefficient spectral u_m :

$$\frac{u_m^{t+1} - u_m^t}{\Delta t} = -i \left(\frac{m}{2a} \right) [u^2]_m^t - \nu \left(\frac{m}{a} \right)^2 u_m^{t+1} \quad (5)$$

soit :

$$u_m^{t+1} = \left[u_m^t - i \left(\frac{m}{2a} \right) \Delta t [u^2]_m^t \right] / \left[1 + \nu \Delta t \left(\frac{m}{a} \right)^2 \right] \quad (6)$$

J'utilise la méthode de transformation pour calculer les coefficients spectraux $[u^2]_m$, c'est à dire qu'une transformée de Fourier inverse est appliquée afin de passer des coefficients spectraux u_m au champ physique u (la discretisation de l'espace physique nécessite au moins $(3M+1)$ points de grille pour éviter le problème d'aliasing des termes quadratiques). Le produit $u \times u$ est effectué dans l'espace physique, et une transformée de Fourier directe est appliquée au résultat.

¹On sait que, classiquement, ce type de schéma numérique est instable pour les équations hyperboliques, mais la présence d'un terme de diffusion permet de le stabiliser et de fournir une solution numérique tout à fait comparable à celle produite avec un schéma temporel plus stable et plus précis de type "Leapfrog" mais nécessitant d'une part un filtre temporel de type Robert-Asselin-Williams pour éviter le découplage entre pas de temps pairs et impairs, et d'autre part le stockage des variables pronostiques sur trois pas de temps. Après 48 h d'intégration, j'ai pu noter que les différences maximales étaient inférieures à 0,4 %.

3. Dynamique de type frontale

Dans un premier temps, il s'agit de valider le modèle proposé en le comparant à des solutions déjà publiées. J'ai, pour cela, repris le cadre expérimental de Rabier and Liu (2003) fournissant suffisamment de détails techniques et de résultats pour permettre une telle comparaison.

La condition initiale de forme sinusoïdale s'écrit :

$$u(x, 0) = -U \sin(x/a) \quad (7)$$

avec $U = 20$ m/s et $a = 1250$ km pour un domaine 1D périodique : $-\pi a \leq x \leq \pi a$.

Elle permet de produire une dynamique de type frontale communément observée sur le champ de vent atmosphérique. La propriété principale de l'évolution d'une erreur initiale est de conduire à une croissance rapide de la variance d'erreur près du front (zone de convergence). Comme proposé par Rabier and Liu (2003), j'ai utilisé une valeur du nombre de Reynolds $Re = 2\pi a U / \nu = 100$ pour lequel le développement maximum au niveau du front en $x = 0$ (gradient $\partial u / \partial x$ maximum) est atteint après un temps critique $t_c = (a/U) \times \pi/2 \simeq 27$ h.

J'ai utilisé une troncature $T42$ avec une grille de collocation pour les calculs points de grille comportant 128 points ($N = 3M + 2$ avec $M = 42$). Rabier and Liu (2003) ont utilisé une troncature $T41$ avec une grille de collocation comportant 83 points ($N = 2M + 1$ avec $M = 41$). Normalement cette grille dite linéaire ne devrait être utilisée qu'avec un schéma d'advection Semi-Lagrangien où les termes quadratiques de l'advection Eulérienne disparaissent. Dans la pratique, les résultats restent très proches entre les deux grilles. J'ai toutefois préféré garder une grille de collocation qui évite l'aliasing des termes quadratiques. Concernant le pas de temps, aucune indication n'est donnée dans l'article de Rabier and Liu (2003). J'ai choisi un pas de temps assez faible $\Delta t = 600$ s² conduisant à un nombre de Courant ($U \Delta t / \Delta x$) de 0.195, permettant d'assurer des solutions stables pour les versions linéarisées de ce modèle.

Le vent zonal u est représenté sur la Figure 1 (ligne du haut) à l'instant initial, après 24 h de simulation et après 48 h de simulation. On observe la dynamique frontale qui se crée autour de $x = 0$ avec une atténuation de l'amplitude au cours du temps induite par les processus dissipatifs. La solution obtenue est très proche de celle montrée par Rabier and Liu (2003) (voir la ligne du haut de la Figure 2) avec comme différence principale d'utilisation chez ces auteurs d'une avance

²J'ai réalisé des tests conduisant à une solution stable du modèle non-linéaire jusqu'à 48 h avec un pas de temps de 2 h

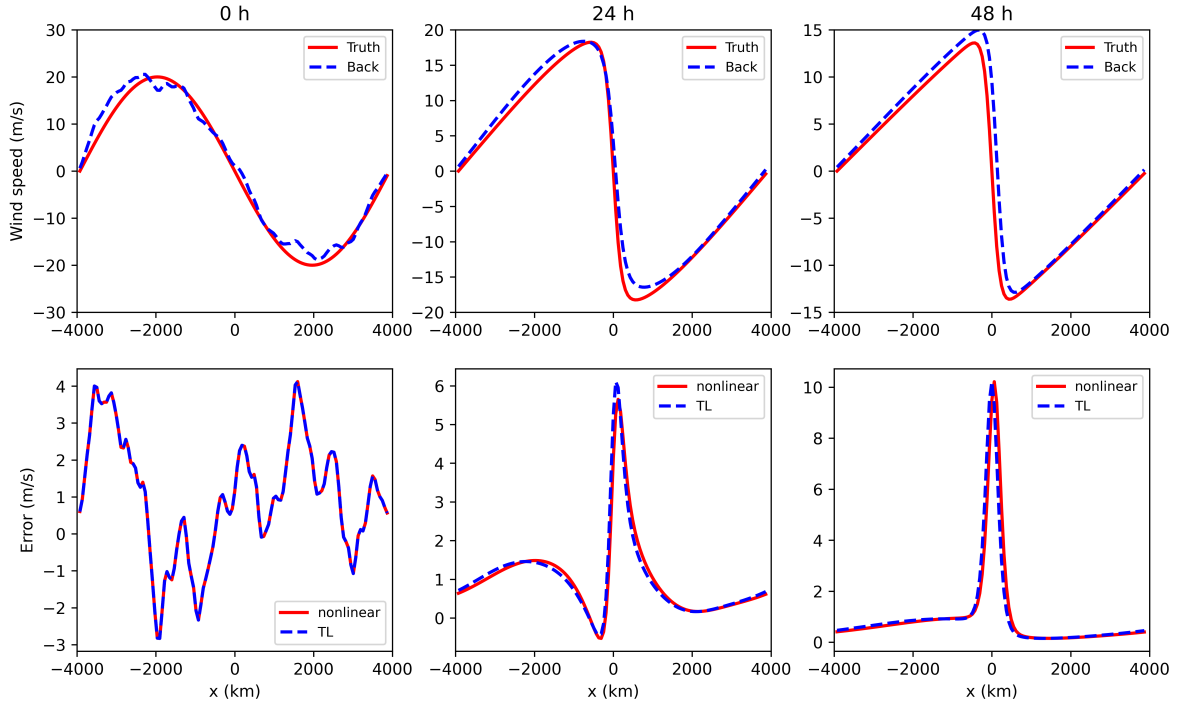


Figure 1: Dynamique de type frontale (Equation de Burgers 1D). Figures du haut : évolution de champ de vent avec en trait plein le champ "vrai" et en tiretés le champ d'ébauche. Figures du bas : évolution du champ d'erreur avec en trait plein la différence entre deux intégrations du modèle non-linéaire et en tiretés la propagation de l'erreur initiale en utilisant le modèle linéaire tangent. Cette figure est à comparer avec la Figure 2 de l'article de Rabier and Liu (2003) présentée en Figure 2 de ce rapport.

temporelle de type "Leapfrog" avec un filtre d'Asselin.

J'ai ensuite, comme proposé par Rabier and Liu (2003), examiné l'évolution temporelle d'une erreur initiale en construisant un champ d'ébauche initiale $u_b(x, 0)$ par ajout à la condition initiale $u(x, 0)$ d'un bruit aléatoire spatialement corrélé. Les corrélations d'erreurs de l'ébauche sont décrites par un modèle autorégressif du second ordre (Thiébaux et al., 1986) avec une longueur de corrélation $L_b = 208$ km sur la base de Liu and Rabier (2002) et un écart-type d'erreur d'ébauche uniforme $\sigma_b = 2$ m/s (Rabier and Liu, 2003). Les coefficients spectraux du champ d'ébauche s'écrivent (Desroziers et al., 2014) :

$$[x_b]_m = x_m + \mathbf{B}^{1/2} \eta_m \quad (8)$$

où \mathbf{B} est la matrice de covariances d'erreurs de l'ébauche et η_m les coefficients spectraux d'un bruit

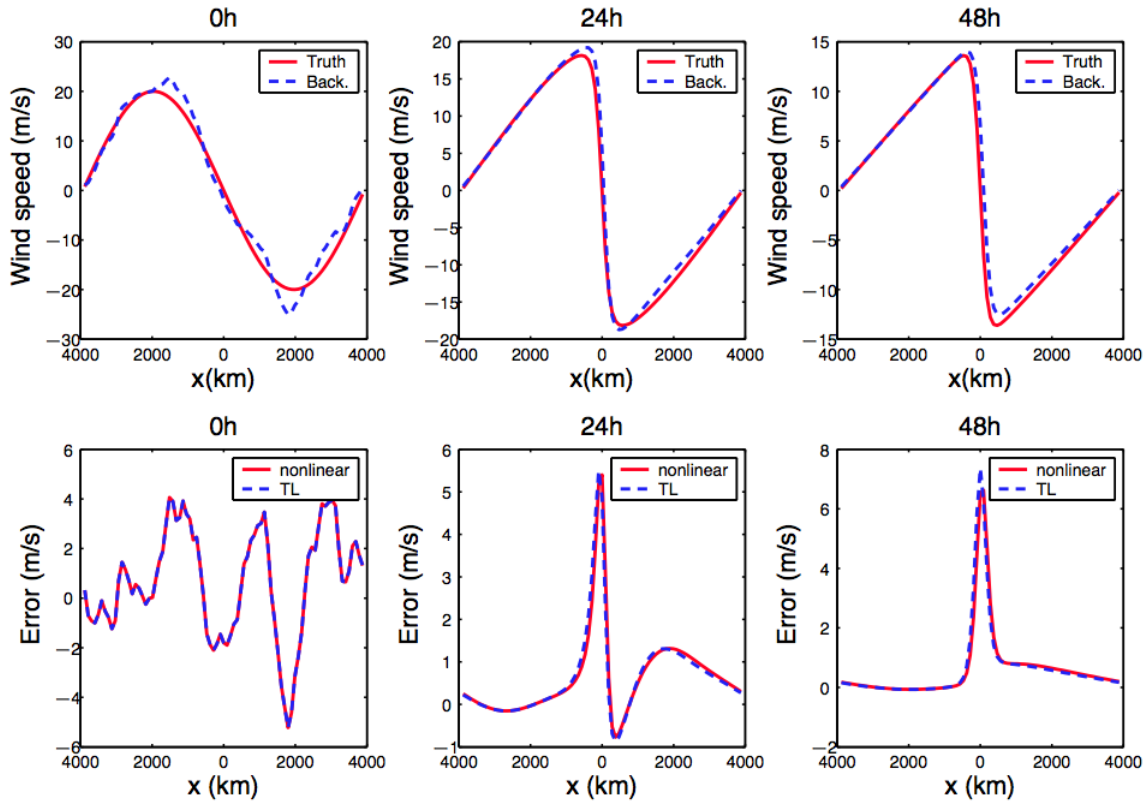


Figure 2: Dynamique de type frontale (Equation de Burgers 1D). Ce sont les mêmes champs que ceux présentés sur la Figure 1 mais issus de l'article de Rabier and Liu (2003).

Gaussien de moyenne nulle et d'écart-type un.

La matrice \mathbf{B} (dans l'espace spectral) peut se décomposer comme (Fisher, 2003) :

$$\mathbf{B} = \mathbf{\Sigma}^T \mathbf{C} \mathbf{\Sigma} \quad (9)$$

où \mathbf{C} est la matrice de corrélations (qui est diagonale dans l'espace spectral pour des fonctions homogènes isotropes) et $\mathbf{\Sigma}$ est la matrice des écart-types d'erreurs (que l'on exprime dans l'espace physique $\mathbf{\Sigma}'$ sous forme d'une matrice diagonale). On passe de $\mathbf{\Sigma}'$ à $\mathbf{\Sigma}$, au moyen de transformées de Fourier directe \mathcal{S} et inverse \mathcal{S}^{-1} :

$$\mathbf{\Sigma} = \mathbf{\Sigma}'^T = \mathcal{S} \mathbf{\Sigma}' \mathcal{S}^{-1} \quad (10)$$

Cette décomposition permet d'exprimer simplement la racine carrée de la matrice \mathbf{B} comme :

$$\mathbf{B}^{1/2} = \mathbf{C}^{1/2} \mathcal{S} \mathbf{\Sigma}' \mathcal{S}^{-1} \quad (11)$$

Pour une fonction de corrélation dans l'espace physique (*Second Order Auto-Regressive model*) valant :

$$Q(x) = \left(1 + \frac{|x|}{L_b}\right) \exp\left(-\frac{|x|}{L_b}\right) \quad (12)$$

la matrice de corrélations \mathbf{C} s'écrit dans l'espace spectral (voir Daley (1991) page 117) :

$$C_{m,m} = q(m) = \frac{c_1}{\left[1 + (mL_b/a)^2\right]^2} \quad C_{m,m'} = 0 \quad m \neq m' \quad (13)$$

c_1 est un coefficient de normalisation. Il permet d'obtenir une densité spectrale normalisée (Ménard, 1994) :

$$\frac{1}{2M+1} \sum_{m=-M}^M |q(m)| = 1$$

J'ai alors examiné la propagation de cette erreur initiale $\delta u = u(x, 0) - u_b(x, 0)$ par l'équation linéaire tangente :

$$\frac{\partial(\delta u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u \delta u) = \nu \frac{\partial^2(\delta u)}{\partial x^2} \quad (14)$$

Il apparaît sur la Figure 1 (ligne du bas) que l'erreur de prévision définie par $[\mathcal{M}(u) - \mathcal{M}(u_b)]$ augmente au cours du temps avec les plus fortes valeurs localisées au niveau de la zone de convergence entre un écoulement d'ouest et un écoulement d'est, induisant de forts gradients au voisi-

nage de $x = 0$ (zone de frontogénèse). C'est ainsi que l'erreur maximale vaut 10 m/s après 48 h d'intégration dans une zone étroite autour de $x = 0$. Au contraire, les erreurs initiales décroissent dans les zones de frontolyse. Si l'on s'intéresse maintenant à l'évolution de la perturbation initiale δu par le modèle linéaire tangent $M(\delta u)$, on constate que la solution proposée après 24 h et 48 h est très proche de la différence entre les deux solutions non-linéaires, montrant que ce modèle reproduit correctement l'évolution temporelle des erreurs jusqu'à 2 jours d'intégration. La précision de l'approximation linéaire-tangente apparaît donc suffisante pour réaliser des expériences d'assimilation avec des fenêtres temporelles allant jusqu'à 24 h. La comparaison de ces résultats avec ceux de Rabier and Liu (2003) (Figures 1 et 2) montre un très bon accord qualitatif des solutions trouvées. Toutefois, il n'est pas possible de se comparer quantitativement car la perturbation initiale, étant par construction aléatoire, n'est pas la même dans les deux expériences.

4. Assimilation de données

4.1 Le modèle adjoint

L'étape suivante vers l'assimilation variationnelle de données est le développement du modèle adjoint M^* du modèle linéaire-tangent M développé et validé dans la section précédente. Dans la mesure où le modèle que j'ai développé est discrétisé dans l'espace de Fourier, les coefficients u_m sont des nombres complexes. C'est ainsi que l'adjoint est ici la transposée conjuguée (alors qu'avec des nombres réels on se contente d'une simple transposition). Pour une expression non linéaire (écrite en FORTRAN) du type³ :

$$x5 = a * y5 * *2 \quad (15)$$

L'expression linéaire tangente correspondante sera :

$$x = 2.0 * a * y5 * y \quad (16)$$

et l'expression adjointe s'écrira :

$$y = y + 2.0 * \text{CONJG}(a * y5) * x \quad (17)$$

$$x = 0.0 \quad (18)$$

³Les variables se terminant par un 5 représentent la trajectoire autour de laquelle les perturbations sont linéarisées

La définition d'un produit scalaire⁴ permet d'écrire l'équation adjointe de l'équation linéaire tangente (14) en s'appuyant sur l'égalité :

$$\langle u_1, \mathbf{M}(u_2) \rangle = \langle \mathbf{M}^*(u_1), u_2 \rangle \quad (19)$$

où \mathbf{M} est l'opérateur linéaire tangent et \mathbf{M}^* l'opérateur adjoint et ce pour deux vecteurs u_1 et u_2 (réels ou complexes) quelconques. Au moyen d'intégrations par parties, il est possible d'écrire l'équation adjointe continue de l'équation (14) (voir par exemple l'article de Peuch et al. (2000)) :

$$\frac{\partial(\delta^*u)}{\partial t} + u \frac{\partial(\delta^*u)}{\partial x} - \delta u^* \frac{\partial u}{\partial x} = -\nu \frac{\partial^2(\delta^*u)}{\partial x^2} \quad (20)$$

Cette équation, intégrée dans le temps de manière rétrograde (d'où l'inversion du signe pour la viscosité), permet d'obtenir le gradient d'une fonctionnelle par rapport à un instant initial (que l'on cherche à corriger), connaissant ce gradient à un instant t (où sont disponibles des observations).

Dans la pratique, cette équation continue n'est pas utilisée et ce sont les équations discrétisées sous forme d'un programme informatique qui sont transformées ligne à ligne au moyen de règles décrites par exemple dans Talagrand (1991).

Une fois ce codage réalisé, la cohérence entre la version linéaire-tangente (TL) et la version adjointe (AD) est vérifiée au moyen de l'égalité (19).

D'un point de vue pratique, j'ai considéré une perturbation initiale $\delta u_1 = \mathbf{B}^{1/2}\eta$ en entrée de la version TL du modèle de Burgers dont l'évolution temporelle donne : $\delta u_2 = \mathbf{M}(\delta u_1)$. Ce vecteur est ensuite utilisé en entrée de la version AD du modèle de Burgers, conduisant à l'évolution $\delta u_3 = \mathbf{M}^*(\delta u_2)$. Ainsi ces trois vecteurs (constitués de champs spectraux) permettent de vérifier l'égalité suivante :

$$\langle \delta u_2, \delta u_2 \rangle = \langle \delta u_3, \delta u_1 \rangle \quad (21)$$

Soit :

$$\langle \delta u_2, \mathbf{M}(\delta u_1) \rangle = \langle \mathbf{M}^*(\delta u_2), \delta u_1 \rangle \quad (22)$$

Si les composantes du vecteur δu_i s'écrivent $(x_i)_m$, on doit donc avoir :

$$2 \sum_{m=-M}^M (x_2)_m (x_2)_m^* = \sum_{m=-M}^M (x_3)_m (x_1)_m^* + (x_3)_m^* (x_1)_m \quad (23)$$

⁴ $\langle u, v \rangle = \int_{-\pi a}^{\pi a} u v dx$

L'exposant * correspond au nombre complexe conjugué. Avec différents vecteurs aléatoires η , j'ai obtenu les résultats suivants pour une fenêtre temporelle de 48 h :

```
scal1 = 1.9842448770064132  scal2 = 1.9842448770064136  ratio = 0.99999999999999978
scal1 = 2.3473422152271843  scal2 = 2.3473422152271799  ratio = 1.00000000000000020
scal1 = .62807538568448917  scal2 = .62807538568448895  ratio = 1.00000000000000004
scal1 = 1.8742301720619858  scal2 = 1.8742301720619854  ratio = 1.00000000000000002
```

où `scal1` est le membre de gauche de l'équation (23), `scal2` le membre de droite et `ratio` le rapport `scal1/scal2`. Ceci montre que le modèle adjoint est exact à la précision machine (programme FORTRAN exécuté en double précision).

4.2 Les transformées spectrales

Les transformées de Fourier directe et inverse sont au cœur de la méthode spectrale. Comme ces transformées sont linéaires, elles ne posent pas de problème pour la dérivation d'un modèle linéaire tangent (utilisation telles quelles). Pour d'écriture d'un modèle adjoint, il faut considérer les transformées de Fourier adjointes. On peut montrer que l'adjoint \mathcal{S}^* d'une transformée de Fourier directe \mathcal{S} (resp. inverse) est, à un facteur près, une transformée de Fourier inverse \mathcal{S}^{-1} (resp. directe)⁵, soit :

$$\mathcal{S}^* = \mathcal{S}^{-1}/N \quad (\mathcal{S}^{-1})^* = N \times \mathcal{S} \quad (24)$$

où N est le nombre de points de la grille de collocation.

D'un point de vue pratique, supposons que nous ayons un sous-programme FORTRAN `fft_d` qui estime les coefficients de Fourier `u_m` d'un champ physique `u` (Transformée directe) et un autre `fft_i` qui estime le champ physique `u` à partir des coefficients de Fourier `u_m` (Transformée inverse), on écrira l'expression adjointe de la Transformée directe comme :

```
.  call  fft_i(u_m,zvar)
.  u(:) = u(:) + zvar(:)/n
.  u_m(:) = (0.0, 0.0)
```

De même pour l'expression adjointe de la Transformée inverse :

```
.  call  fft_d(u,zvar_m)
.  u_m(:) = u_m(:) + zvar_m(:) * n
```

⁵Ce qui est la définition d'un opérateur unitaire

. $u(\cdot) = 0.0$

où n est le nombre de points de la grille de collocation.

Remarque : La nécessité d'avoir une variable intermédiaire $zvar$ ou $zvar_m$ vient du fait que le résultat des Transformées de Fourier est utilisé en mode direct après l'appel au sous-programme et donc qu'en mode adjoint les variables u et u_m existent déjà avant cet appel. On ne doit donc pas les écraser, mais plutôt ajouter le résultat aux dérivées partielles déjà calculées.

4.3 Factorisation de la matrice B^{-1}

D'après la factorisation de la matrice B (Eq. 9), il est possible d'écrire la matrice inverse comme :

$$B^{-1} = \Sigma^{-1} C^{-1} (\Sigma^T)^{-1}$$

soit :

$$B^{-1} = S \Sigma'^{-1} (S)^{-1} C^{-1} S \Sigma'^{-1} (S)^{-1} = L^T L$$

avec :

$$L = C^{-1/2} S \Sigma'^{-1} (S)^{-1} \quad L^T = S \Sigma'^{-1} (S)^{-1} C^{-T/2}$$

4.4 Assimilation variationnelle

Il s'agit de minimiser une fonction coût J qui dépend d'un vecteur de contrôle à l'instant initial x (dans l'espace spectral c'est un vecteur de nombres complexes)⁶ :

$$J(x) = \frac{1}{2} (x - x_b)^* B^{-1} (x - x_b) + \frac{1}{2} [\mathcal{H}(x) - y_o]^* R^{-1} [\mathcal{H}(x) - y_o]$$

Afin d'améliorer le préconditionnement de ce problème de minimisation, on effectue le changement de variable classique suivant : $\chi = L(x - x_b) = L\delta x$

$$x = L^{-1} \chi + x_b \quad L^{-1} = S \Sigma' (S)^{-1} C^{1/2} \quad (L^{-1})^* = C^{1/2} S \Sigma' (S)^{-1}$$

Dans le nouvel espace, la fonction coût prend la forme :

$$J(\chi) = \frac{1}{2} \chi^* \chi + \frac{1}{2} [\mathcal{H}(L^{-1} \chi + x_b) - y_o]^* R^{-1} [\mathcal{H}(L^{-1} \chi + x_b) - y_o]$$

⁶J'ai ainsi remplacé l'exposant de transposée x^T par un exposant de transposée conjuguée x^*

permettant d'écrire son gradient comme :

$$\nabla_{\chi} J = \chi + (\mathbf{L}^{-1})^* \mathbf{H}^* \mathbf{R}^{-1} [\mathcal{H}(\mathbf{L}^{-1} \chi + \mathbf{x}_b) - \mathbf{y}_o]$$

où l'opérateur \mathcal{H} combine une intégration du modèle numérique (\mathcal{M}) (depuis l'instant initial jusqu'au temps où les observations sont disponibles) avec une transformée spectrale inverse (\mathcal{S}^{-1}) et un "véritable" opérateur d'observation dans l'espace physique⁷ (\mathcal{H}_1) (i.e. $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1(\mathcal{S})^{-1} \mathcal{M}$ donc $\mathbf{H}^* = \mathbf{N} \mathbf{M}^* \mathcal{S} \mathbf{H}_1^*$).

4.5 Formulation incrémentale de l'assimilation variationnelle

On minimise une fonction de coût pour laquelle le vecteur de contrôle est un incrément : $\delta \mathbf{x} = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_b)$. Cette formulation a été proposée pour la première fois par Courtier et al. (1994). On passe ainsi de l'équation (4.4) à l'équation suivante :

$$J(\delta \mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\delta \mathbf{x})^* \mathbf{B}^{-1} (\delta \mathbf{x}) + \frac{1}{2} [\mathbf{H}(\delta \mathbf{x}) - \mathbf{d}_o]^* \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{H}(\delta \mathbf{x}) - \mathbf{d}_o]$$

où $\mathbf{d}_o = \mathbf{y}_o - \mathcal{H}(\mathbf{x}_b)$, en effectuant un développement au premier ordre de l'opérateur d'observation qui permet d'écrire : $\mathcal{H}(\mathbf{x}) = \mathcal{H}(\mathbf{x}_b) + \mathbf{H} \delta \mathbf{x}$.

Avec le même changement de variable que précédemment : $\chi = \mathbf{L} \delta \mathbf{x}$, la fonction coût s'écrit :

$$J(\chi) = \frac{1}{2} \chi^* \chi + \frac{1}{2} [\mathbf{H} \mathbf{L}^{-1} \chi - \mathbf{d}_o]^* \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{H} \mathbf{L}^{-1} \chi - \mathbf{d}_o] \quad (25)$$

Le gradient de la fonction coût prend alors la forme :

$$\nabla_{\chi} J = [\mathbf{I} + (\mathbf{L}^{-1})^* \mathbf{H}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{L}^{-1}] \chi - (\mathbf{L}^{-1})^* \mathbf{H}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d}_o = \mathbf{A} \chi - \mathbf{b} \quad (26)$$

En regroupant les opérateurs \mathbf{H} et \mathbf{L}^{-1} sous la forme de $\mathbf{D} = \mathbf{H} \mathbf{L}^{-1}$, le gradient de la fonction coût s'écrit de manière plus compacte comme :

$$\nabla_{\chi} J = [\mathbf{I} + \mathbf{D}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{D}] \chi - \mathbf{D}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d}_o \quad (27)$$

⁷Comme par exemple un code de transfert radiatif pour simuler une radiance au sommet de l'atmosphère à partir d'un profil de température et d'humidité

Si des observations sont disponibles à plusieurs instants t_i sur la fenêtre temporelle d'assimilation, le gradient s'écrira alors :

$$\nabla_{\chi} J = \left[\mathbf{I} + \sum_i \mathbf{D}_i^* \mathbf{R}_i^{-1} \mathbf{D}_i \right] \chi - \sum_i \mathbf{D}_i^* \mathbf{R}_i^{-1} \mathbf{d}_{oi} \quad (28)$$

Il est possible d'annuler ce gradient en résolvant un problème d'algèbre linéaire du type : $\mathbf{A}\chi = \mathbf{b}$ en utilisant une méthode de type gradient conjugué (Navon and Legler, 1987)⁸. Notons que la matrice $\mathbf{A} = \nabla \nabla_{\chi} J$ qui est la Hessienne de la fonction coût est l'inverse de la matrice de covariances d'erreurs d'analyse dans l'espace χ (Fisher and Courtier, 1995).

4.6 Formulation incrémentale avec des boucles externes

On minimise une fonction coût pour le vecteur de contrôle $\delta \mathbf{x}^k = (\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$:

$$J(\delta \mathbf{x}^k) = \frac{1}{2} [\delta \mathbf{x}^k - (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}^k)]^* \mathbf{B}^{-1} [\delta \mathbf{x}^k - (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}^k)] + \frac{1}{2} [\mathbf{H}(\delta \mathbf{x}^k) - \mathbf{d}_o^k]^* \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{H}(\delta \mathbf{x}^k) - \mathbf{d}_o^k]$$

avec $\mathbf{d}_o^k = \mathbf{y}_o - \mathcal{H}(\mathbf{x}^k)$. \mathbf{H} est linéarisé autour de l'état \mathbf{x}^k .

Avec le changement de variable : $\chi^k = \mathbf{L} \delta \mathbf{x}^k$, la fonction coût J s'écrit :

$$J(\chi^k) = \frac{1}{2} (\chi^k)^* (\chi^k) + \frac{1}{2} (\mathbf{x}^k - \mathbf{x}_b) \mathbf{L}^* \mathbf{L} (\mathbf{x}^k - \mathbf{x}_b) + \frac{1}{2} [\mathbf{H} \mathbf{L}^{-1} \chi^k - \mathbf{d}_o^k]^* \mathbf{R}^{-1} [\mathbf{H} \mathbf{L}^{-1} \chi^k - \mathbf{d}_o^k]$$

conduisant à la forme suivante pour son gradient :

$$\nabla_{\chi^k} J = [\mathbf{I} + (\mathbf{L}^{-1})^* \mathbf{H}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{L}^{-1}] \chi^k - (\mathbf{L}^{-1})^* \mathbf{H}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d}_o$$

Les itérations conduisant à un nouveau problème linéarisé autour d'une trajectoire actualisée débutent par : $\mathbf{x}^0 = \mathbf{x}_b$.

Comme précédemment, ce gradient peut s'écrire de manière plus compacte :

$$\nabla_{\chi^k} J = [\mathbf{I} + \mathbf{D}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{D}] \chi^k - \mathbf{D}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d}_o \quad (29)$$

Généralement, la matrice \mathbf{R} de covariances d'erreurs d'observations est supposée diagonale (on néglige les corrélations). Ainsi l'inversion de cette matrice se réduit à une simple multiplication des éléments x_i d'un vecteur d'intérêt par $1/(\sigma_o)_i^2$

⁸On peut utiliser une méthode de minimisation de type "gradient conjugué" même lorsque la fonction-coût n'est pas quadratique. Toutefois, la méthode pour la recherche du pas optimal dans la direction de descente est plus complexe.

4.7 La méthode du gradient conjugué

On cherche à résoudre le problème linéaire suivant :

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (30)$$

Il s'agit de trouver le vecteur \mathbf{x} connaissant le vecteur \mathbf{b} et la matrice \mathbf{A} symétrique définie positive ou hermitienne dans l'espace complexe (i.e. $\mathbf{x}^* \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} > 0$.)

Le problème précédent est équivalent à la recherche du minimum \mathbf{x} d'une fonction quadratique J définie comme :

$$J(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}^* \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}) - \mathbf{b}^* \cdot \mathbf{x} + c \quad (31)$$

en annulant son gradient par rapport à \mathbf{x} :

$$\nabla J(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b} = 0 \quad (32)$$

On considère le processus itératif suivant :

À l'itération k , un nouvel estimé \mathbf{x}_{k+1} est recherché à partir du précédent \mathbf{x}_k comme :

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{d}_k \quad (33)$$

où \mathbf{d}_k est une direction de descente et α_k un scalaire tel que $J(\mathbf{x}_{k+1})$ soit minimum dans la direction \mathbf{d}_k .

Pour un problème quadratique, on peut montrer que sa valeur est :

$$\alpha_k = \frac{||\nabla J(\mathbf{x}_k)||^2}{\mathbf{d}_k^* \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{d}_k} \quad (34)$$

On calcule ensuite une nouvelle direction de descente orthogonale à toutes les précédentes (au sens de la forme quadratique \mathbf{A} , soit $\mathbf{x}^* \mathbf{A} \mathbf{y} = 0$) ainsi que le nouveau gradient :

$$\mathbf{d}_{k+1} = -\nabla J(\mathbf{x}_k) + \beta_k \mathbf{d}_k \quad \beta_k = \frac{||\nabla J(\mathbf{x}_{k+1})||^2}{||\nabla J(\mathbf{x}_k)||^2} \quad (35)$$

$$\nabla J(\mathbf{x}_{k+1}) = \nabla J(\mathbf{x}_k) - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{d}_k \quad (36)$$

D'un point de vue pratique, j'ai utilisé l'algorithme itératif décrit dans Desrozières et al. (2014) (*Algorithm 1*), soit :

$$\mathbf{d}_{-1} = \mathbf{0}$$

$$\beta_{-1} = 0$$

$$\chi = 0$$

$$\mathbf{g}_0 = \mathbf{D}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d}_o$$

for $k=0, K-1$

$$\cdot \quad \mathbf{d}_k = \mathbf{g}_k + \beta_{k-1} \mathbf{d}_{k-1}$$

$$\cdot \quad \mathbf{f}_k = (\mathbf{I} + \mathbf{D}^* \mathbf{R}^{-1} \mathbf{D}) \mathbf{d}_k$$

$$\cdot \quad \alpha_k = (\mathbf{g}_k^* \mathbf{g}_k) / (\mathbf{d}_k^* \mathbf{f}_k)$$

$$\cdot \quad \chi_{k+1} = \chi_k + \alpha_k \mathbf{d}_i$$

$$\cdot \quad \mathbf{g}_{k+1} = \mathbf{g}_k - \alpha_k \mathbf{f}_k$$

$$\cdot \quad \beta_k = (\mathbf{g}_{k+1}^* \mathbf{g}_{k+1}) / (\mathbf{g}_k^* \mathbf{g}_k)$$

end

$$\delta \mathbf{x} = \mathbf{L}^{-1} \chi$$

4.8 Test du gradient de la fonction coût

J'ai défini un incrément $\delta \mathbf{x} = \mathbf{x}_t - \mathbf{x}_b$, calculé avec l'équation (8), qui permet d'estimer la fonction coût $J(\chi)$ suivant l'équation (25) de la formulation incrémentale, avec $\chi = \mathbf{L} \delta \mathbf{x}$. J'ai ensuite estimé le gradient de la fonction coût au moyen de la formule (27) qui fait intervenir divers opérateurs linéaires tangents et adjoints (dont le modèle de Burgers). Il est ensuite possible de recalculer la fonction coût en faisant varier χ dans la direction du gradient soit : $\chi + \alpha \nabla_\chi J$ pour des valeurs de α variant entre 0.1 et 10^{-13} , permettant de vérifier la formule de Taylor (voir par exemple Thépaut and Courtier (1991) ou Pailleux et al. (1991)) :

$$\frac{[J(\chi + \alpha \nabla_\chi J) - J(\chi)]}{\alpha \|\nabla_\chi J\|^2} \rightarrow 1 + o(\alpha) \quad (37)$$

Le Tableau rassemble la comparaison du numérateur et du dénominateur ainsi que du rapport des deux pour des valeurs de α décroissantes. La fenêtre d'intégration est de 24 h avec des observations en fin de période sur la grille de collocation à raison d'une tous les 4 points de grille (32 observations uniformément réparties). Les propriétés de la matrice \mathbf{B} sont les mêmes que celles introduites pour évaluer l'approximation linéaire tangente ($\sigma_b = 2$ m/s et $L_b = 208$ km). J'ai considéré une erreur d'observations constante : $\sigma_o = 1$ m/s. On constate bien que le rapport des deux quantités converge bien vers 1 et ce de manière linéaire avec la taille de la perturbation pour des valeurs

α	Ratio	$[J(\chi + \alpha \nabla_{\chi} J) - J(\chi)]$	$\alpha \ \nabla_{\chi} J\ ^2$
10^{-1}	30.828891435376701	3273731.9064173298	106190.38680906522
10^{-2}	3.9828891435376725	42294.453876989195	10619.038680906522
10^{-3}	1.2982889143537661	1378.6580200514777	1061.9038680906522
10^{-4}	1.0298288914353666	109.35792832867241	106.19038680906522
10^{-5}	1.0029828891434573	10.650714096101751	10.619038680906522
10^{-6}	1.0002982889122460	1.0622206222403747	1.0619038680906521
10^{-7}	1.0000298288939564	0.10619355435085254	0.10619038680906522
10^{-8}	1.0000029828187276	1.0619070355573967E-2	1.0619038680906521E-2
10^{-9}	1.0000002976929299	1.0619041842119259E-3	1.0619038680906522E-3
10^{-10}	1.0000000284384281	1.0619038982895290E-4	1.0619038680906522E-4
10^{-11}	0.99999980682537903	1.0619036629577749E-5	1.0619038680906522E-5
10^{-12}	0.99999933576382527	1.0619031627356890E-6	1.0619038680906522E-6
10^{-13}	1.0000047957954703	1.0619089607644128E-7	1.0619038680906522E-7

Table 1: Rapport entre un calcul de la différence entre deux valeurs d’une fonction-coût J et une estimation faite au moyen d’un gradient ∇J utilisant la méthode adjointe pour une large gamme de taille de perturbations α en vue de vérifier la formule de Taylor (Eq. 37). On considère une fenêtre temporelle de 24 h avec des observations disponibles à la fin de la fenêtre un point sur quatre par rapport à la grille de collocation. La spécification des matrices \mathbf{B} et \mathbf{R} est fournie dans le corps du texte.

de α comprises entre 10^{-3} et 10^{-8} . Lorsque les valeurs de α sont trop élevées, l’approximation linéaire tangente n’est plus valide, et lorsqu’elles sont trop faibles les calculs sont entachés d’erreurs liées à la précision machine. Je peux donc en conclure que le calcul du gradient au moyen des opérateurs adjoints pour le modèle de Burgers ainsi que pour l’opérateur d’observations incluant les transformées de Fourier est correct. Il est donc possible d’utiliser cet ensemble pour effectuer des expériences d’assimilation variationnelle.

5. Résultats d’expériences d’assimilation

J’ai réalisé plusieurs expériences d’assimilation avec une fenêtre temporelle de 24 h. Comme précédemment, j’ai choisi 32 observations uniformément réparties sur le cercle de latitude avec une erreur associée de 1 m/s. Pour la matrice de covariances d’erreurs de l’ébauche, l’écart-type est de

2 m/s avec une corrélation horizontale de 208 km suivant un modèle de type *Second Order Auto Regressive*. Les observations sont créées à partir d'une simulation de référence (vérité) en leur ajoutant un bruit Gaussien. J'ai examiné la sensibilité des résultats à la fréquence temporelle des observations sur la fenêtre, en considérant des observations disponibles toutes les 24 h, toutes les 12 h, toutes les 6 h et toutes les 3 h. Après chaque période d'assimilation, j'ai effectué une prévision de 24 h qui est comparée à la vérité.

Dans un premier temps j'ai examiné l'évolution de la fonction-coût (dans sa formulation incrémentale) et de son gradient en fonction des itérations de l'algorithme de minimisation (gradient conjugué) pour chacune des expériences proposées. C'est ce qui est représenté sur la Figure 3. Il apparaît que la convergence est très rapide, le minimum de J étant atteint en une dizaine d'itérations même si son gradient continue à décroître de plusieurs ordre de grandeur entre les itérations 10 et 20. La valeur de la fonction-coût initiale double entre chaque expérience où l'on utilise deux fois plus d'observations. Le minimum de la fonction-coût augmente aussi de manière proportionnelle au nombre d'observations assimilées. Dans un système optimal, cette valeur notée J_{min} devrait être égale (en moyenne statistique) à la moitié de la dimension du vecteur d'observations (Talagrand, 1999). Cette optimalité n'est pas strictement respectée : par exemple pour une assimilation tri-horaire cette valeur devrait être de 128 alors que la valeur trouvée est de 99. Il faudrait sans doute réaliser un ensemble important d'expériences de faire la moyenne des valeurs de J_{min} pour tester plus avant cette optimalité. Même pour la convergence la plus difficile (observations toutes les 3 h), le gradient de J a été réduit de 6 ordres de grandeur par le processus de minimisation.

6. Conclusions

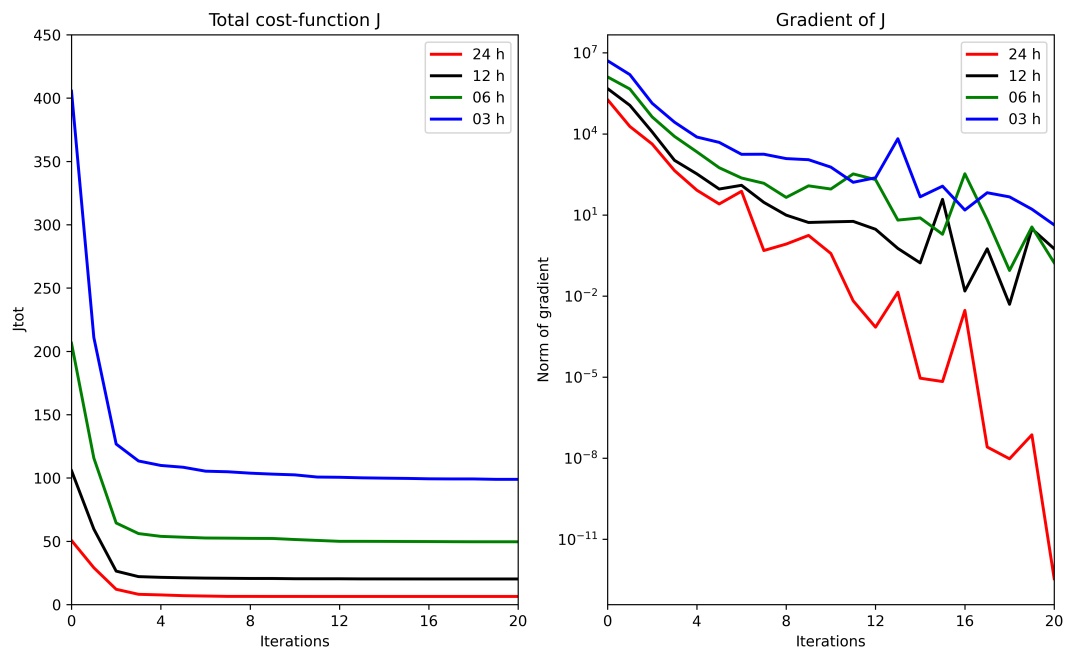


Figure 3: Evolution de la fonction-coût et de son gradient au cours du processus de minimisation pour 4 expériences assimilant des observations toutes les 24 h, toutes les 12 h, toutes les 6 h et toutes les 3 h sur une fenêtre temporelle de 24 h.

References

- Courtier, P., Thépaut, J.-N., and Hollingsworth, A. (1994). A strategy for operational implementation of 4D-Var, using an incremental approach. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 120(519):1367–1387.
- Daley, R. (1991). *Atmospheric data analysis*. Cambridge Academic Press.
- Desroziers, G., Camino, J.-T., and Berre, L. (2014). 4D-EnVar: link with 4D state formulation of variational assimilation and different possible implementations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140(684):2097–2110.
- Fisher, M. (2003). Background error covariance modelling. In *Seminar on Recent developments in data assimilation for atmosphere and ocean, 8-12 September 2003*, pages 45–64, Shinfield Park, Reading. ECMWF.
- Fisher, M. and Courtier, P. (1995). Estimating the covariance matrices of analysis and forecast error in variational data assimilation. Technical Report 220, ECMWF, Shinfield Park, Reading.
- Liu, Z.-Q. and Rabier, F. (2002). The interaction between model resolution, observation resolution and observation density in data assimilation: A one-dimensional study. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 128(582):1367–1386.
- Ménard, R. (1994). *Kalman filtering of Burgers' equation and its application to atmospheric data assimilation*. PhD thesis, McGill University.
- Navon, I. M. and Legler, D. M. (1987). Conjugate-gradient methods for large-scale minimization in meteorology. *Monthly Weather Review*, 115(8):1479 – 1502.
- Pailleux, J., Heckley, W., Vasiljevic, D., Thépaut, J.-N., Rabier, F., Cardinali, C., and Andersson, E. (1991). Development of a variational assimilation system. Technical Report 179, ECMWF, Shinfield Park, Reading.
- Peuch, A., Thépaut, J.-N., and Pailleux, J. (2000). Dynamical impact of total-ozone observations in a four-dimensional variational assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 126(566):1641–1659.

- Rabier, F. and Liu, Z. (2003). Variational data assimilation: Theory and overview. In *Seminar on Recent developments in data assimilation for atmosphere and ocean, 8-12 September 2003*, pages 29–43, Shinfield Park, Reading. ECMWF.
- Talagrand, O. (1991). Adjoint models. In *Seminar on numerical methods in atmospheric models, Vol II, 9-13 September 1991*, pages 73–114, Shinfield Park, Reading. ECMWF.
- Talagrand, O. (1999). A posteriori evaluation and verification of analysis and assimilation algorithms. In *Workshop on diagnosis of data assimilation systems, 2-4 November 1998*, pages 17–28, Shinfield Park, Reading. ECMWF.
- Thiébaux, J. H., Mitchell, H. L., and Shantz, D. L. (1986). Horizontal structure of hemispheric forecast error correlations for geopotential and temperature. *Monthly Weather Review*, 114(6):1048 – 1066.
- Thépaut, J.-N. and Courtier, P. (1991). Four-dimensional variational data assimilation using the adjoint of a multilevel primitive-equation model. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 117(502):1225–1254.