УДК 519.6, 551.46

Чувствительность функционалов от решения задачи вариационного усвоения данных с одновременным восстановлением потоков тепла и начального состояния для модели термодинамики моря*

В.П. Шутяев, Е.И. Пармузин

Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука Российской академии наук, ул. Губкина, 8, Москва, 119333
E-mails: victor.shutyaev@mail.ru (Шутяев В.П.), parm@inm.ras.ru (Пармузин Е.И.)

Английская версия этой статьи печатается в журнале "Numerical Analysis and Applications" № 4, Vol. 13, 2020.

Шутяев В.П., Пармузин Е.И. Чувствительность функционалов от решения задачи вариационного усвоения данных с одновременным восстановлением потоков тепла и начального состояния для модели термодинамики моря // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2020. — Т. 23, № 4. — С. 457–470.

Для математической модели термодинамики моря, разработанной в Институте вычислительной математики РАН, рассматривается задача вариационного усвоения данных наблюдений с целью одновременного восстановления потоков тепла на поверхности моря и начального состояния модели. Исследована чувствительность функционалов от решения к данным наблюдений в рассматриваемой задаче вариационного усвоения и приведены результаты численных экспериментов для модели динамики Балтийского моря.

DOI: 10.15372/SJNM20200408

Ключевые слова: *вариационное усвоение данных наблюдений, оптимальное управление, сопряженные уравнения, ковариационные матрицы, чувствительность функционалов, модель термодинамики моря.*

Shutyaev V.P., Parmuzin E.I. Sensitivity of functionals of the solution of a variational data assimilation problem with simultaneous reconstruction of heat fluxes and the initial state for the sea thermodynamics model // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2020. — Vol. 23, № 4. — P. 457–470.

For the mathematical model of the sea thermodynamics, developed at the Institute of Numerical Mathematics of the Russian Academy of Sciences, the problem of variational data assimilation is considered, aimed at simultaneous reconstruction of the sea surface heat flux and the initial state of the model. The sensitivity of functionals with respect to observational data in the considered problem of variational assimilation is studied, and the results of numerical experiments for the model of the Baltic Sea dynamics are presented.

Keywords: *variational data assimilation, optimal control, adjoint equations, covariance matrices, sensitivity of functionals, sea thermodynamics model.*

---

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-71-20035, в рамках которого проводились исследования в пунктах 2 и 3) и РФФИ (проект № 18-01-00267, в рамках которого были проведены численные расчеты).

1. Введение

В последние годы возрастает интерес к методам исследования и численного решения задач вариационного усвоения данных, представляющих собой конкретные задачи оптимального управления и играющих фундаментальную роль в теоретическом осмысливании и математическом моделировании процессов и явлений из самых различных областей знаний. Наибольшее развитие эти методы получили в метеорологии и океанографии, где данные наблюдений усваиваются в моделях атмосферы и океана с целью получения начальных и граничных условий или других параметров модели для последующего моделирования и прогноза [1–8].

Наряду с исследованием разрешимости, разработкой и обоснованием алгоритмов численного решения задач вариационного усвоения данных наблюдений важную роль играет анализ чувствительности оптимального решения и его функционалов к погрешностям данных наблюдений [9–14]. В работе [14] проведено исследование чувствительности функционалов от оптимального решения задачи вариационного усвоения данных о температуре поверхности для модели термодинамики моря. Настоящая работа обобщает результаты работы [14] на случай задачи вариационного усвоения данных с целью одновременного восстановления потоков тепла и начального состояния модели. С использованием гессиана функции стоимости доказана теорема о представлении градиента функционала по отношению к данным наблюдений, сформулирован алгоритм вычисления градиента функционала и приведены результаты численных экспериментов для модели динамики Балтийского моря, разработанной в ИВМ РАН.

2. Задача вариационного усвоения данных для модели термодинамики моря

Рассмотрим задачу термодинамики моря в виде [15, 16]:

$$\begin{aligned}
&T_t + (\bar U, \mathrm{Grad})T - \mathrm{Div}(\hat a_T \cdot \mathrm{Grad}\, T) = f_T \quad \text{в } D\times(0,\bar t),\\
&T = T_0 \quad \text{при } t=0 \text{ в } D,\\
&-\nu_T \frac{\partial T}{\partial z} = Q \quad \text{на } \Gamma_S \times (0,\bar t),\\
&\frac{\partial T}{\partial N_T} = 0 \quad \text{на } \Gamma_{w,\mathrm{c}} \times (0,\bar t),\\
&\bar U_n^{(-)} T + \frac{\partial T}{\partial N_T} = \bar U_n^{(-)} d_T + Q_T \quad \text{на } \Gamma_{w,\mathrm{op}} \times (0,\bar t),\\
&\frac{\partial T}{\partial N_T} = 0 \quad \text{на } \Gamma_H \times (0,\bar t),
\end{aligned} \tag{2.1}$$

где $T = T(x,y,z,t)$ — неизвестная функция температуры, $t \in (0,\bar t)$, $(x,y,z) \in D = \Omega \times (0,H)$, $\Omega \subset R^2$, $H = H(x,y)$ – функция рельефа дна, $Q = Q(x,y,t)$ — суммарный приток тепла, $\bar U = (u,v,w)$, $\widehat a_T = \mathrm{diag}((a_T)_{ii})$, $(a_T)_{11} = (a_T)_{22} = \mu_T$, $(a_T)_{33} = \nu_T$, $f_T = f_T(x,y,z,t)$ — заданные функции. Скорости u, v, w зависят в общем случае от пространства и времени, а коэфффициенты μ_T, ν_T предполагаются зависящими только от пространственных переменных на рассматриваемом интервале по времени. Граница области $\Gamma \equiv \partial D$ представляется как объединение четырех непересекающихся частей Γ_S, $\Gamma_{w,\mathrm{op}}$, $\Gamma_{w,\mathrm{c}}$, Γ_H, где $\Gamma_S = \Omega$ (невозмущенная поверхность моря), $\Gamma_{w,\mathrm{op}}$ — жидкая (открытая) часть вертикальной боковой границы, $\Gamma_{w,\mathrm{c}}$ — твердая часть вертикальной боковой границы, Γ_H — дно моря. Другие обозначения и детальное описание постановки задачи можно найти в работах [17–19].

Запишем задачу (2.1) в форме операторного уравнения в $\big(W_2^1(D)\big)^*$:

$$\begin{aligned} &T_t + LT = F + BQ \quad \text{для} \quad \text{п.в.}\ t \in (0, \bar{t}\,), \\ &T = T_0 \quad \text{при}\ t = 0, \end{aligned} \tag{2.2}$$

где равенство понимается в обобщенном смысле, а именно

$$(T_t, \widehat{T}) + (LT, \widehat{T}) = F(\widehat{T}) + (BQ, \widehat{T}) \quad \forall \widehat{T} \in W_2^1(D), \tag{2.3}$$

а операторы L, F, B определяются интегральными соотношениями:

$$\begin{aligned} (LT, \widehat{T}) &\equiv \int\limits_D \big(-T\mathrm{Div}(\bar{U}\widehat{T})\big)\, dD + \int\limits_{\Gamma_{w,\text{op}}} \bar{U}_n^{(+)}\, T\widehat{T}\, d\Gamma + \int\limits_D \widehat{a}_T\, \mathrm{Grad}(T)\cdot \mathrm{Grad}(\widehat{T})\, dD, \\ F(\widehat{T}) &= \int\limits_{\Gamma_{w,\text{op}}} \big(Q_T + \bar{U}_n^{(-)}\, d_T\big)\widehat{T}\, d\Gamma + \int\limits_D f_T \widehat{T}\, dD, \\ (T_t, \widehat{T}) &= \int\limits_D T_t \widehat{T}\, dD, \\ (BQ, \widehat{T}) &= \int\limits_\Omega Q\widehat{T}\,|_{z=0}\, d\Omega, \end{aligned}$$

при этом функции $\widehat{a}_T$, Q_T, f_T, Q таковы, что равенство (2.3) имеет смысл.

Рассмотрим задачу об усвоении данных о температуре поверхности моря, следуя [14, 18]. Предположим, что в задаче (2.1) функции $T_0 \in L_2(D)$ и $Q \in L_2\big(\Omega \times (0, \bar{t})\big)$ не известны. Пусть задана функция данных наблюдений $T_{\text{obs}}(x, y, t)$ на $\bar{\Omega} \equiv \Omega \cup \partial\Omega$ при $t \in (0, \bar{t})$, которая по своему физическому смыслу есть приближение к функции поверхностной температуры на Ω, т.е. к $T\,|_{z=0}$. Считаем, что $T_{\text{obs}} \in L_2\big(\Omega \times (0, \bar{t})\big)$. Допускается случай, когда T_{obs} имеется лишь на некотором подмножестве из $\Omega \times (0, \bar{t})$, характеристическую функцию которого обозначим через m_0. Вне этого подмножества для определенности считаем T_{obs} нулевой.

Будем предполагать, что данные наблюдений T_{obs} заданы с ошибками, а именно

$$T_{\text{obs}} = m_0 T^t\,|_{z=0} + \xi_{\text{obs}},$$

где T^t — точное решение задачи (2.1) при некотором $Q = Q^t$, а $\xi_{\text{obs}} \in Y_{\text{obs}} = L_2\big(\Omega \times (0, \bar{t})\big)$ рассматривается как ошибка наблюдений. Предполагается, что ошибки ξ_{obs} случайные и они распределены по нормальному закону (гауссовские) с нулевым математическим ожиданием и ковариационным оператором $R\,\cdot = E[(\cdot, \xi_{\text{obs}})\xi_{\text{obs}}]$, $R : Y_{\text{obs}} \to Y_{\text{obs}}$, где E — математическое ожидание. Ковариационные матрицы ошибок наблюдений играют важную роль при вариационном усвоении данных: обратные к ним матрицы включаются в качестве весовых операторов в исходный функционал стоимости. В дальнейшем мы будем предполагать, что R положительно определен и, значит, обратим.

Рассмотрим следующую регуляризованную задачу вариационного усвоения данных: найти T, T_0 и Q, такие что

$$
\begin{cases}
T_t + LT = F + BQ, \qquad t \in (0,\bar t),\\
T = T_0 \quad \text{при} \;\; t = 0,\\
J(T_0,Q) = \inf\limits_{T_0,Q} J(T_0,Q),
\end{cases}
\tag{2.4}
$$

где

$$
J(T_0,Q) = \frac{\alpha}{2}\int\limits_0^{\bar t}\int\limits_\Omega \left|Q - Q^{(0)}\right|^2 d\Omega\, dt + \frac{\beta}{2}\int\limits_D \left|T_0 - T^{(0)}\right|^2 dD +
$$
$$
\frac{1}{2}\int\limits_0^{\bar t}\int\limits_\Omega (m_0 T\,|_{z=0} - T_{\rm obs}) R^{-1} (m_0 T\,|_{z=0} - T_{\rm obs})\, d\Omega\, dt,
$$

$T^{(0)} = T^{(0)}(x,y,z)$, $Q^{(0)} = Q^{(0)}(x,y,t)$ — заданные функции. Весовые коэффициенты α, $\beta = \mathrm{const} > 0$ играют роль параметров регуляризации по Тихонову [20].

При $\alpha, \beta > 0$ поставленная задача вариационного усвоения данных имеет единственное решение. Существование оптимального решения следует из классических результатов теории экстремальных задач [2], так как можно показать, что решение задачи (2.2) непрерывно зависит от начальной функции T_0 и потока Q (имеют место априорные оценки в соответствующих функциональных пространствах).

Необходимое условие оптимальности $\operatorname{grad} J = 0$, которое определяет решение сформулированной задачи вариационного усвоения данных, приводит к так называемой "системе оптимальности" [2]:

$$
\begin{gathered}
T_t + LT = F + BQ, \qquad t \in (0,\bar t),\\
T = T_0 \quad \text{при} \;\; t = 0,
\end{gathered}
\tag{2.5}
$$

$$
\begin{gathered}
-(T^*)_t + L^*T^* = BR^{-1}m_0(B^*T - T_{\rm obs}), \qquad t \in (0,\bar t),\\
T^* = 0 \quad \text{при} \;\; t = \bar t,
\end{gathered}
\tag{2.6}
$$

$$
\beta\big(T_0 - T^{(0)}\big) + T^*\,|_{t=0} = 0 \quad \text{в} \;\; D,
\tag{2.7}
$$

$$
\alpha\big(Q - Q^{(0)}\big) + B^*T^* = 0 \quad \text{на} \;\; \Omega \times (0,\bar t),
\tag{2.8}
$$

где L^*, B^* — операторы, сопряженные к L, B соответственно.

3. Чувствительность к данным наблюдений

Рассмотрим функцию $G(T,T_0,Q)$, зависящую от T, T_0, Q, которая предполагается вещественнозначной и может рассматриваться как функционал на $X = L_2\big(D \times (0,\bar t)\big) \times L_2(D) \times L_2\big(\Omega \times (0,\bar t)\big)$. Нас интересует чувствительность функционала $G(T,T_0,Q)$ к данным наблюдений $T_{\rm obs}$ при условии, что T, T_0, Q получены после вариационного усвоения из системы оптимальности (2.5)–(2.8). Как известно [1, 21], чувствительность функционала определяется градиентом по $T_{\rm obs}$, который является производной Гато:

$$
\frac{dG}{dT_{\rm obs}} = \frac{\partial G}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial T_{\rm obs}} + \frac{\partial G}{\partial T_0}\frac{\partial T_0}{\partial T_{\rm obs}} + \frac{\partial G}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial T_{\rm obs}}.
\tag{3.1}
$$

Обозначим через $\delta T_{\rm obs}$ вариацию функции $T_{\rm obs}$. Из (2.5)–(2.8) выводим систему оптимальности для вариаций:

$$\begin{gathered}\delta T_t + L\delta T = B\delta Q, \quad t\in(0,\bar t),\\ \delta T = \delta T_0 \quad \text{при} \ \ t=0,\end{gathered} \tag{3.2}$$

$$\begin{gathered}-(\delta T^*)_t + L^*\delta T^* = BR^{-1}m_0(B^*\delta T - \delta T_{obs}), \quad t\in(0,\bar t),\\ \delta T^* = 0 \quad \text{при} \ \ t=\bar t,\end{gathered} \tag{3.3}$$

$$\beta\delta T_0 + \delta T^*\,|_{t=0} = 0 \quad \text{в} \ \ D, \tag{3.4}$$

$$\alpha\delta Q + B^*\delta T^* = 0 \quad \text{на} \ \ \Omega\times(0,\bar t). \tag{3.5}$$

Система (3.2)–(3.5) эквивалентна следующей задаче усвоения данных для определения δT, δT_0, δQ таких, что

$$\begin{cases}\delta T_t + L\delta T &= B\delta Q, \quad t\in(0,\bar t),\\ \qquad\quad \delta T &= \delta T_0 \quad \text{при} \ \ t=0,\\ S(\delta T_0,\delta Q &= \inf\limits_{T_0,Q} S(T_0,Q),\end{cases} \tag{3.6}$$

где

$$S(\delta T_0,\delta Q) = \frac{\alpha}{2}\int\limits_0^{\bar t}\int\limits_\Omega |\delta Q|^2\,d\Omega\,dt + \frac{\beta}{2}\int\limits_D |\delta T_0|^2\,dD +$$
$$\frac12\int\limits_0^{\bar t}\int\limits_\Omega (m_0\delta T\,|_{z=0} - \delta T_{\rm obs})R^{-1}(m_0\delta T\,|_{z=0} - \delta T_{\rm obs})\,d\Omega\,dt. \tag{3.7}$$

Справедлива

Лемма. *Гессиан $\mathcal H$ функционала (3.7) определяется на $\Theta = (\xi,\eta)^\top$, $\xi\in L_2(D)$, $\eta\in L_2(\Omega\times(0,\bar t))$ последовательным решением задач*:

$$\begin{gathered}\psi_t + L\psi = B\eta, \quad t\in(0,\bar t),\\ \psi = \xi \quad \textit{при} \ \ t=0,\end{gathered} \tag{3.8}$$

$$\begin{gathered}-(\psi^*)_t + L^*\psi^* = BR^{-1}m_0B^*\psi, \quad t\in(0,\bar t),\\ \psi^* = 0 \quad \textit{при} \ \ t=\bar t,\end{gathered} \tag{3.9}$$

$$\mathcal H\Theta = \big(\beta\xi + \psi^*\,|_{t=0}, \alpha\eta + B^*\psi^*\big)^\top. \tag{3.10}$$

Доказательство. Согласно системе оптимальности (3.2)–(3.5) градиент функционала (3.7) определяется по формуле

$$\operatorname{grad} S = (\beta\delta T_0 + \delta T^*\,|_{t=0}, \alpha\delta Q + B^*\delta T^*)^\top,$$

где δT^* — решение сопряженной задачи (3.3). Продифференцируем последнюю формулу еще раз по δT_0, δQ, чтобы получить гессиан

$$\mathcal H\Theta = (\beta\xi + \psi^*\,|_{t=0}, \alpha\eta + B^*\psi^*)^\top,$$

где $\Theta = (\xi,\eta)^\top$ — вариация $(\delta T_0,\delta Q)^\top$, а ψ^* — решение сопряженной задачи (3.9), которая есть не что иное как продифференцированная задача (3.3). При этом ψ — решение задачи (3.8), которая получена из (3.2) дифференцированием по δT_0, δQ.

Определим оператор $\mathcal{C} : L_2\big(\Omega \times (0,\bar{t})\big) \to L_2(D) \times L_2\big(\Omega \times (0,\bar{t})\big)$, действующий на функции $g \in L_2\big(\Omega \times (0,\bar{t})\big)$ по формуле

$$\mathcal{C}g = (\theta^* \,|_{t=0}, B^*\theta^*)^\top, \tag{3.11}$$

где θ^* — решение сопряженной задачи

$$\begin{gathered} -(\theta^*)_t + L^*\theta^* = BR^{-1}m_0 g, \quad t \in (0,\bar{t}), \\ \theta^* = 0 \quad \text{при} \ \ t = \bar{t}. \end{gathered} \tag{3.12}$$

Используя (3.8)–(3.12), нетрудно видеть [22], что система (3.2)–(3.5) эквивалентна уравнению для вариации оптимального решения $\delta\Theta = (\delta T_0, \delta Q)^\top$

$$\mathcal{H}\delta\Theta = \mathcal{C}\delta T_{\mathrm{obs}}. \tag{3.13}$$

Гессиан $\mathcal{H}$ действует в $L_2(D) \times L_2\big(\Omega \times (0,\bar{t})\big)$ с областью определения $D(\mathcal{H}) = L_2(D) \times L_2\big(\Omega \times (0,\bar{t})\big)$, он ограничен, самосопряжен и неотрицательно определен. Если α, $\beta > 0$, то $\mathcal{H}$ положительно определен. Оператор $\mathcal{C}$ ограничен.

Уравнение (3.13) имеет единственное решение при α, $\beta > 0$

$$\delta\Theta = \mathcal{H}^{-1}\mathcal{C}\delta T_{\mathrm{obs}}. \tag{3.14}$$

Формула (3.14) дает в явном виде выражение для вариаций оптимального решения δT_0, δQ через вариацию функции данных наблюдений δT_{obs}. Уравнение вида (3.14) было положено в [14] в основу исследования чувствительности оптимального решения и его функционалов к ошибкам данных наблюдений.

Справедлива

Теорема 3.1. *Градиент функционала $G(T, T_0, Q)$ по T_{obs} имеет вид*

$$\frac{dG}{dT_{\mathrm{obs}}} = \mathcal{C}^*\mathcal{H}^{-1}\mathcal{F}, \tag{3.15}$$

где

$$\mathcal{F} = \left(\phi^* \,|_{t=0} + \frac{\partial G}{\partial T_0}, B^*\phi^* + \frac{\partial G}{\partial Q}\right)^\top, \tag{3.16}$$

$\mathcal{C}^*$ — оператор, сопряженный к $\mathcal{C}$, $\mathcal{H}$ — гессиан, определенный формулами (3.8)–(3.10), а ϕ^* — решение сопряженной задачи

$$\begin{gathered} -(\phi^*)_t + L^*\phi^* = \frac{\partial G}{\partial T}, \quad t \in (0,\bar{t}), \\ \phi^* = 0 \quad \textit{при} \ \ t = \bar{t}. \end{gathered} \tag{3.17}$$

Доказательство. Рассмотрим значение градиента (3.1) на вариации δT_{obs}

$$\left(\frac{dG}{dT_{\mathrm{obs}}}, \delta T_{\mathrm{obs}}\right)_{Y_{\mathrm{obs}}} = \left(\frac{\partial G}{\partial T}, \delta T\right)_{Y} + \left(\frac{\partial G}{\partial T_0}, \delta T_0\right)_{L_2(D)} + \left(\frac{\partial G}{\partial Q}, \delta Q\right)_{Y_{\mathrm{obs}}}, \tag{3.18}$$

где δT_{obs} — вариация функции T_{obs}, $\delta T = \frac{\partial T}{\partial T_{\mathrm{obs}}}\delta T_{\mathrm{obs}}$, $\delta T_0 = \frac{\partial T_0}{\partial T_{\mathrm{obs}}}\delta T_{\mathrm{obs}}$, $\delta Q = \frac{\partial Q}{\partial T_{\mathrm{obs}}}\delta T_{\mathrm{obs}}$ — решения системы (3.2)–(3.5), $Y = L_2\big(D \times (0,\bar{t})\big)$.

Задача (3.17) является сопряженной по отношению к (3.2), поэтому, в силу соотношения сопряженности,

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}, \delta T\right)_Y = (\phi^*, B\delta Q)_Y + (\phi^* \mid_{t=0}, \delta T_0)_{L_2(D)} = (B^*\phi^*, \delta Q)_{Y_{obs}} + (\phi^* \mid_{t=0}, \delta T_0)_{L_2(D)}. \quad (3.19)$$

Из (3.18)–(3.19) получаем

$$\left(\frac{dG}{dT_{\text{obs}}}, \delta T_{\text{obs}}\right)_{Y_{\text{obs}}} = \left(\phi^* \mid_{t=0} + \frac{\partial G}{\partial T_0}, \delta T_0\right)_{L_2(D)} + \left(B^*\phi^* + \frac{\partial G}{\partial Q}, \delta Q\right)_{Y_{\text{obs}}} = \big(\mathcal{F}, \delta\Theta\big), \quad (3.20)$$

где $\delta\Theta = (\delta T_0, \delta Q)^\top$, $\mathcal{F}$ определяется по формуле (3.16), а $(\cdot,\cdot)$ обозначает скалярное произведение в $L_2(D) \times L_2\big(\Omega \times (0,\bar{t})\big)$.

Уравнение для δQ определяется формулой (3.14), отсюда

$$(\mathcal{F}, \delta\Theta) = (\mathcal{F}, \mathcal{H}^{-1}\mathcal{C}\delta T_{\text{obs}})_{Y_{\text{obs}}} = (\mathcal{C}^*\mathcal{H}^{-1}\mathcal{F}, \delta T_{\text{obs}})_{Y_{\text{obs}}}. \quad (3.21)$$

Таким образом, из (3.18)–(3.21) заключаем, что

$$\left(\frac{dG}{dT_{\text{obs}}}, \delta T_{\text{obs}}\right)_{Y_{\text{obs}}} = (\mathcal{C}^*\mathcal{H}^{-1}\mathcal{F}, \delta T_{\text{obs}})_{Y_{\text{obs}}}, \quad (3.22)$$

откуда следует утверждение теоремы.

$\square$

Пусть $\Theta = \mathcal{H}^{-1}\mathcal{F}$, тогда из (3.15) имеем

$$\frac{dG}{dT_{\text{obs}}} = \mathcal{C}^*\Theta. \quad (3.23)$$

Нетрудно убедиться в том, что сопряженный оператор $\mathcal{C}^* : L_2(D) \times L_2\big(\Omega \times (0,\bar{t})\big) \to L_2\big(\Omega \times (0,\bar{t})\big)$ определяется на $\Theta = (\xi, \eta)^\top$, $\xi \in L_2(D)$, $\eta \in L_2\big(\Omega \times (0,\bar{t})\big)$ по формуле

$$\mathcal{C}^*\Theta = m_0 R^{-1} B^* \phi, \quad (3.24)$$

где ϕ — решение задачи

$$\begin{aligned} \phi_t + L\phi = B\eta, \quad & t \in (0,\bar{t}), \\ \phi = \xi \quad \text{при} \ & t = 0. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Тогда

$$\frac{dG}{dT_{\text{obs}}} = \mathcal{C}^*\Theta = m_0 R^{-1} B^* \phi. \quad (3.26)$$

Из (3.23)–(3.26) и (3.15)–(3.17) заключаем, что тем самым доказана теорема. $\square$

Теорема 3.2. *Градиент* $\frac{dG}{dT_{\text{obs}}}$ *определяется последовательным выполнением следующих шагов*:

1) решить сопряженную задачу

$$\begin{aligned} -(\phi^*)_t + L^*\phi^* = \frac{\partial G}{\partial T}, \quad & t \in (0,\bar{t}), \\ \phi^* = 0 \quad \textit{при} \ & t = \bar{t}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

полагая

$$\mathcal{F} = \left(\phi^* \mid_{t=0} + \frac{\partial G}{\partial T_0}, B^*\phi^* + \frac{\partial G}{\partial Q}\right)^\top;$$

2) найти $\Theta = (\xi, \eta)^\top$ *как решение уравнения с гессианом*:

$$\mathcal{H}\Theta = \mathcal{F};$$

3) решить прямую задачу

$$\begin{gathered} \phi_t + L\phi = B\eta, \quad t \in (0, \bar{t}), \\ \phi = \xi \quad \textit{при} \ t = 0; \end{gathered} \tag{3.28}$$

4) вычислить градиент функционала по формуле:

$$\frac{dG}{dT_{\text{obs}}} = m_0 R^{-1} B^* \phi. \tag{3.29}$$

В численных примерах, следуя [14], рассматривались функционалы вида

$$G(T, T_0, Q) = \int\limits_0^{\bar{t}} dt \int\limits_\Omega F^*(x, y, t) T(x, y, 0, t)\, d\Omega, \tag{3.30}$$

где $F^*(x, y, t)$ — некая весовая функция, связанная с полем температуры на поверхности $z = 0$. Так для определения средней температуры в избранной акватории океана ω при $z = 0$ в интервале $t_1 - \tau \le t \le t_1$ в качестве F^* выбирается функция

$$F^*(x, y, t) = \begin{cases} 1\big/(\tau \operatorname{mes} \omega), & \text{если} (x, y) \in \omega, \ \ t_1 - \tau \le t \le t_1, \\ 0, & \text{в противном случае}, \end{cases} \tag{3.31}$$

где $\operatorname{mes}\omega$ означает площадь района ω. В этом случае функционал (3.30) представляется в виде

$$G(T, T_0, Q) = \frac{1}{\tau} \int\limits_{t_1 - \tau}^{t_1} dt \left(\frac{1}{\operatorname{mes}\omega} \int\limits_\omega T(x, y, 0, t)\, d\Omega\right). \tag{3.32}$$

С использованием обозначений, введенных выше, функционал (3.30) записывается в виде скалярного произведения:

$$G(T, T_0, Q) = \int\limits_0^{\bar{t}} (BF^*, T)\, dt = (BF^*, T)_Y, \quad Y = L_2(D \times (0, \bar{t})).$$

В силу

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}, \delta T\right)_Y = (BF^*, \delta T)_Y$$

производные от G по T, T_0, Q определяются по формулам:

$$\frac{\partial G}{\partial T} = BF^*, \qquad \frac{\partial G}{\partial T_0} = \frac{\partial G}{\partial Q} = 0. \tag{3.33}$$

Алгоритм (3.27)–(3.29) с учетом конкретного вида производных (3.33) использовался при численных расчетах для оценки чувствительности функционалов, связанных с температурой после усвоения данных наблюдений.

4. Результаты численных экспериментов

В настоящем пункте мы приведем результаты численных экспериментов по исследованию чувствительности функционалов к данным наблюдений в задаче одновременного восстановлении начального состояния T_0 и функции потока тепла Q в акватории Балтийского моря путем вариационного усвоения данных о температуре поверхности моря. Расчеты проводились на основе σ-модели гидротермодинамики Балтийского моря, разработанной в ИВМ РАН [19], основанной на методе расщепления [23] и дополненной процедурой вариационного усвоения данных [18, 25] с учетом ковариационных матриц ошибок наблюдений. При проведении численных экспериментов были выбраны модификации граничных условий согласно [23].

Модельная область Балтийского моря расположена от $9.375°$ в. д. до $30.375°$ в. д. и от $53.625°$ с. ш. до $65.9375°$ с. ш. Пространственное разрешение модели составляет $1/16° \times 1/32° \times 25$ по долготе, широте и вертикали. Сеточная область в горизонтальной плоскости содержит 336×394 узлов, σ-уровни неравномерно распределены по глубине. Шаг по времени равен 5 мин.

В качестве T_{obs} использовались среднесуточные данные температуры поверхности Балтийского моря, полученные с портала океанографических данных COPERNICUS (http://marine.copernicus.eu). Для пересчета данных наблюдений на расчетную сетку численной модели термодинамики Балтийского моря использовались алгоритмы интерполяции данных [26, 27]. В качестве весовых коэффициентов в функционале стоимости при решении задачи усвоения данных, следуя [14], были взяты диагональные элементы ковариационной матрицы R, которые вычисляются, исходя из статистических свойств данных наблюдений. Статистические характеристики были рассчитаны на основе данных наблюдений за 27 лет, с 1982 года по 2009, отдельно для каждого дня года [14].

В качестве $Q^{(0)}$ использовался среднеклиматический поток, полученный по данным реанализа NCEP (National Center for Environmental Prediction). С помощью упомянутой модели гидротермодинамики, дополненной "процедурой усвоения" температуры поверхности T_{obs}, были проведены расчеты на акватории Балтийского моря, в которых работал алгоритм усвоения лишь в некоторые моменты времени t_j, при этом $t_{j+1} = \bar{t} = t_j + \Delta t$. Это означает, что до момента t_j производился расчет по модели без алгоритма усвоения, а начиная с t_j алгоритм усвоения включался, при этом начальное поле $T^{(0)}$ для усвоения задавалось из предыдущего расчета при $t = t_j$. При реализации процедуры усвоения на одном шаге по времени (t_j, t_{j+1}) рассматривалась система вида (2.5)–(2.8), где под (2.5), (2.6) понимаются конечномерные аналоги соответствующих задач. При реализации алгоритма исследования чувствительности параметры регуляризации считались фиксированными. Вопрос о выборе параметров регуляризации в данной статье не рассматривался.

Приведем численный пример. Результаты расчета при $t_0 = 50$ часов (600 временных шагов модели) даны на рисунке 1, где представлен градиент функционала $G(T, T_0, Q)$, связанного со средней температурой поверхности моря после усвоения данных, который получен с помощью алгоритма (3.27)–(3.29). Здесь $\alpha = \beta = 10^{-5}$, $\omega = \Omega$.

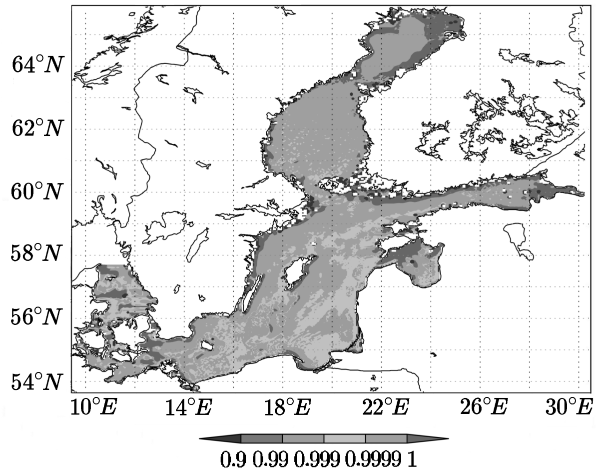

Рис. 1. Градиент функционала $G(T, T_0, Q)$

Более темным цветом выделены зоны, в которых функционал $G(T, T_0, Q)$ наиболее чувствителен к ошибкам в наблюдениях при проведении процедуры усвоения данных. Наибольшие значения градиента соответствуют точкам x, y, лежащим вблизи областей с небольшой глубиной (см. рис. 2). Таким образом, рассматриваемый функционал $G(T, T_0, Q)$ от оптимального решения оказался наиболее чувствительными к погрешностям наблюдений в точках поверхности вблизи этих областей.

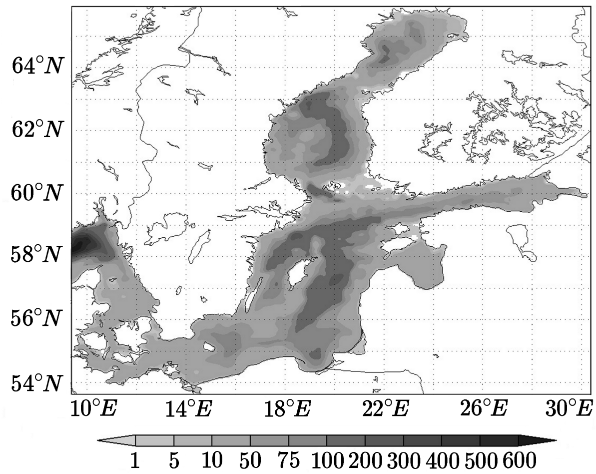

Рис. 2. Топография Балтийского моря

Этот результат подтверждается прямым вычислением функционала $G(T, T_0, Q)$ в соответствии с (3.32), полученным после вариационного усвоения, путем введения возмущений в данные наблюдений T_{obs}, следуя работе [14].

Таким образом, сформулированный алгоритм (3.27)–(3.29) позволяет оценивать чувствительность функционалов, связанных с температурой поверхности моря после усвоения, по отношению к ошибкам данных наблюдений.

5. Заключение

Разработка эффективных алгоритмов исследования чувствительности оптимальных решений и функционалов задач вариационного усвоения данных наблюдений для моделей геофизической гидродинамики – актуальная проблема современной вычислительной математики и информатики и рационального природопользования.

С использованием трехмерной модели гидротермодинамики Балтийского моря, разработанной в ИВМ РАН, в настоящей работе проведено исследование чувствительности функционалов от решения задачи вариационного усвоения данных с одновременным восстановлением потоков тепла на поверхности моря и начального состояния модели. Разработанный алгоритм позволяет вычислять градиенты функционалов от решения задачи после усвоения по отношению к данным наблюдений. Вычисление градиента функционала требует однократного решения уравнения с гессианом функции стоимости и решения прямой и сопряженной задачи. Численные эксперименты для модели динамики Балтийского моря подтверждают работоспособность предложенного алгоритма. Проведенные исследования могут быть полезны для решения проблемы определения районов моря, в которых функционалы от оптимального решения являются наиболее чувствительными к произвольным возмущениям в данных наблюдений при использовании процедуры вариационного усвоения, в том числе в случаях, когда значения этих возмущений заранее не известны.

Литература

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. **Sasaki Y.K.** An objective analysis based on the variational method // J. Meteor. Soc. Japan. — 1958. — Vol. 36. — P. 77–88.
4. **Пененко В.В., Образцов Н.Н.** Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология. — 1976. — № 11. — С. 1–11.
5. **Пененко В.В.** Методы численного моделирования атмосферных процессов. — Л.: Гидрометеоиздат, 1981.
6. **Le Dimet F.-X., Talagrand O.** Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography. — 1986. — Vol. 38, iss. 2. — P. 97–110.
7. **Агошков В.И.** Методы оптимального управления и сопряженных уравнений в задачах математической физики. — М.: ИВМ РАН, 2003.
8. **Mogensen K., Balmaseda M.A., Weaver A.T., Marti M., and Vidard A.** NEMOVAR: a variational data assimilation system for the NEMO ocean model // ECMWF Newsletter. — 2009. — Vol. 120. — P. 17–22.
9. **Le Dimet F.-X., Shutyaev V.** On deterministic error analysis in variational data assimilation // Nonlinear Processes in Geophysics. — 2005. — Vol. 12. — P. 481–490.
10. **Gejadze I., Le Dimet F.-X., and Shutyaev V.P.** On analysis error covariances in variational data assimilation // SIAM J. Sci. Comput. — 2008. — Vol. 30, № 4. — P. 1847–1874.
11. **Gejadze I., Le Dimet F.-X., and Shutyaev V.P.** On optimal solution error covariances in variational data assimilation problems // J. Comp. Phys. — 2010. — Vol. 229. — P. 2159–2178.

12. **Gejadze I., Shutyaev V.P., and Le Dimet F.-X.** Analysis error covariance versus posterior covariance in variational data assimilation // Quarterly J. of the Royal Meteorological Society. — 2013. — Vol. 139. — P. 1826–1841.

13. **Агошков В.И., Пармузин Е.И., Шутяев В.П.** Ассимиляция данных наблюдений в задаче циркуляции Черного моря и анализ чувствительности ее решения // Известия РАН. Физика атмосферы и океана. — 2013. — Т. 49, № 6. — С. 643–654. Перевод: Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Shutyaev V.P. Observational data assimilation in the problem of Black Sea circulation and sensitivity analysis of its solution // Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics. — 2013. — Vol. 49, № 6. — P. 592–602.

14. **Шутяев В.П., Пармузин Е.И.** Чувствительность функционалов к данным наблюдений в задаче вариационного усвоения для модели термодинамики моря // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2019. — Т. 22, № 2. — С. 229–242. Перевод: Shutyaev V.P., Parmuzin E.I. Sensitivity of functionals to observation data in a variational assimilation problem for a sea thermodynamics model // Numerical Analysis and Applications. — 2019. — Vol. 12, № 2. — P. 191–201.

15. **Алексеев В.В., Залесный В.Б.** Численная модель крупномасштабной динамики океана // Вычислительные процессы и системы. — М.: Наука, 1993. — С. 232–253.

16. **Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б.** Математические модели в геофизической гидродинамике и численные методы их реализации. — Л.: Гидрометеоиздат, 1987.

17. **Agoshkov V.I., Gusev A.V., Diansky N.A., and Oleinikov R.V.** An algorithm for the solution of the ocean hydrothermodynamics problem with variational assimilation of the sea level function data // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2007. — Vol. 22, № 2. — P. 1–10.

18. **Агошков В.И., Пармузин Е.И., Шутяев В.П.** Численный алгоритм вариационной ассимиляции данных наблюдений о температуре поверхности океана // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 2008. — Т. 48, № 8. — С. 1371–1391. Перевод: Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Shutyaev V.P. Numerical algorithm for variational assimilation of sea surface temperature data // Comp. Math. Math. Physics. — 2008. — Vol. 48, № 8. — P. 1293–1312.

19. **Zalesny V.B., Gusev A.V., Ivchenko V.O., Tamsalu R., and Aps R.** Numerical model of the Baltic Sea circulation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2013. — Vol. 28, № 1. — P. 85–100.

20. **Тихонов А.Н.** О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации // ДАН СССР. — 1963. — Т. 151, № 3. — С. 501–504. Перевод: Tikhonov A.N. On the regularization of ill-posed problems // Dokl. Akad. Nauk SSSR. — 1963. — Vol. 153, iss. 1. — P. 49–52.

21. **Cacuci D.G.** Sensitivity theory for nonlinear systems: II.Extensions to additional classes of responses // J. Math. Phys. — 1981. — Vol. 22. — P. 2803–2812.

22. **Шутяев В.П.** Операторы управления и итерационные алгоритмы в задачах вариационного усвоения данных. — М.: Наука, 2001.

23. **Zalesny V.B., Marchuk G.I., Agoshkov V.I. et al.** Numerical simulation of large-scale ocean circulation based on multicomponent splitting method // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2010. — Vol. 25, № 6. — P. 581–609.

24. **Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Zalesny V.B. et al.** Variational assimilation of observation data in the mathematical model of the Baltic Sea dynamics // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2015. — Vol. 30, № 4. — P. 203–212.

25. **Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Zakharova N.B., and Shutyaev V.P.** Variational assimilation with covariance matrices of observation data errors for the model of the Baltic Sea dynamics // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2018. — Vol. 33, № 3. — P. 149–160.

26. **Захарова Н.Б., Лебедев С.А.** Интерполяция оперативных данных буев ARGO для ассимиляции данных в модели циркуляции Мирового океана // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. — 2010. — Т. 7, № 4. — С. 104–111.

27. **Zakharova N.B., Agoshkov V.I., and Parmuzin E.I.** The new method of ARGO buoys system observation data interpolation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2013. — Vol. 28, № 1. — P. 67–84.

Поступила в редакцию 11 июня 2019 г.
После исправления 25 декабря 2019 г.
Принята к печати 16 июля 2020 г.

Литература в транслитерации

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. **Sasaki Y.K.** An objective analysis based on the variational method // J. Meteor. Soc. Japan. — 1958. — Vol. 36. — P. 77–88.
4. **Penenko V.V., Obraztsov N.N.** Variacionnyi metod soglasovaniya polei meteorologicheskikh elementov // Meteorologiya i gidrologiya. — 1976. — № 11. — S. 1–11.
5. **Penenko V.V.** Metody chislennogo modelirovaniya atmosfernykh processov. — L.: Gidrometeoizdat, 1981.
6. **Le Dimet F.-X., Talagrand O.** Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography. — 1986. — Vol. 38, iss. 2. — P. 97–110.
7. **Agoshkov V.I.** Metody optimal'nogo upravleniya i sopryazhennykh uravnenii v zadachakh matematicheskoi fiziki. — M.: IVM RAN, 2003.
8. **Mogensen K., Balmaseda M.A., Weaver A.T., Marti M., and Vidard A.** NEMOVAR: a variational data assimilation system for the NEMO ocean model // ECMWF Newsletter. — 2009. — Vol. 120. — P. 17–22.
9. **Le Dimet F.-X., Shutyaev V.** On deterministic error analysis in variational data assimilation // Nonlinear Processes in Geophysics. — 2005. — Vol. 12. — P. 481–490.
10. **Gejadze I., Le Dimet F.-X., and Shutyaev V.P.** On analysis error covariances in variational data assimilation // SIAM J. Sci. Comput. — 2008. — Vol. 30, № 4. — P. 1847–1874.
11. **Gejadze I., Le Dimet F.-X., and Shutyaev V.P.** On optimal solution error covariances in variational data assimilation problems // J. Comp. Phys. — 2010. — Vol. 229. — P. 2159–2178.
12. **Gejadze I., Shutyaev V.P., and Le Dimet F.-X.** Analysis error covariance versus posterior covariance in variational data assimilation // Quarterly J. of the Royal Meteorological Society. — 2013. — Vol. 139. — P. 1826–1841.
13. **Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Shutyaev V.P.** Assimilyaciya dannykh nablyudenii v zadache cirkulyacii CHernogo morya i analiz chuvstvitel'nosti ee resheniya // Izvestiya RAN. Fizika atmosfery i okeana. — 2013. — T. 49, № 6. — S. 643–654. Perevod: Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Shutyaev V.P. Observational data assimilation in the problem of Black Sea circulation and sensitivity analysis of its solution // Izvestiya, Atmospheric and Oceanic Physics. — 2013. — Vol. 49, № 6. — P. 592–602.
14. **Shutyaev V.P., Parmuzin E.I.** Chuvstvitel'nost' funkcionalov k dannym nablyudenii v zadache variacionnogo usvoeniya dlya modeli termodinamiki morya // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2019. — T. 22, № 2. — S. 229–242. Perevod: Shutyaev V.P., Parmuzin E.I. Sensitivity of functionals to observation data in a variational assimilation problem for a sea thermodynamics model // Numerical Analysis and Applications. — 2019. — Vol. 12, № 2. — P. 191–201.

15. **Alekseev V.V., Zalesnyi V.B.** Chislennaya model' krupnomasshtabnoi dinamiki okeana // Vychislitel'nye processy i sistemy. — M.: Nauka, 1993. — S. 232–253.

16. **Marchuk G.I., Dymnikov V.P., Zalesnyi V.B.** Matematicheskie modeli v geofizicheskoi gidrodinamike i chislennye metody ikh realizacii. — L.: Gidrometeoizdat, 1987.

17. **Agoshkov V.I., Gusev A.V., Diansky N.A., and Oleinikov R.V.** An algorithm for the solution of the ocean hydrothermodynamics problem with variational assimilation of the sea level function data // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2007. — Vol. 22, № 2. — P. 1–10.

18. **Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Shutyaev V.P.** Chislennyi algoritm variacionnoi assimilyacii dannykh nablyudenii o temperature poverkhnosti okeana // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 2008. — T. 48, № 8. — S. 1371–1391. Perevod: Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Shutyaev V.P. Numerical algorithm for variational assimilation of sea surface temperature data // Comp. Math. Math. Physics. — 2008. — Vol. 48, № 8. — P. 1293–1312.

19. **Zalesny V.B., Gusev A.V., Ivchenko V.O., Tamsalu R., and Aps R.** Numerical model of the Baltic Sea circulation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2013. — Vol. 28, № 1. — P. 85–100.

20. **Tikhonov A.N.** O reshenii nekorrektno postavlennykh zadach i metode regulyarizacii // DAN SSSR. — 1963. — T. 151, № 3. — S. 501–504. Perevod: Tikhonov A.N. On the regularization of ill-posed problems // Dokl. Akad. Nauk SSSR. — 1963. — Vol. 153, iss. 1. — P. 49–52.

21. **Cacuci D.G.** Sensitivity theory for nonlinear systems: II. Extensions to additional classes of responses // J. Math. Phys. — 1981. — Vol. 22. — P. 2803–2812.

22. **Shutyaev V.P.** Operatory upravleniya i iteracionnye algoritmy v zadachakh variacionnogo usvoeniya dannykh. — M.: Nauka, 2001.

23. **Zalesny V.B., Marchuk G.I., Agoshkov V.I. et al.** Numerical simulation of large-scale ocean circulation based on multicomponent splitting method // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2010. — Vol. 25, № 6. — P. 581–609.

24. **Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Zalesny V.B. et al.** Variational assimilation of observation data in the mathematical model of the Baltic Sea dynamics // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2015. — Vol. 30, № 4. — P. 203–212.

25. **Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Zakharova N.B., and Shutyaev V.P.** Variational assimilation with covariance matrices of observation data errors for the model of the Baltic Sea dynamics // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2018. — Vol. 33, № 3. — P. 149–160.

26. **Zakharova N.B., Lebedev S.A.** Interpolyaciya operativnykh dannykh buev ARGO dlya assimilyacii dannykh v modeli cirkulyacii Mirovogo okeana // Sovremennye problemy distancionnogo zondirovaniya Zemli iz kosmosa. — 2010. — T. 7, № 4. — S. 104–111.

27. **Zakharova N.B., Agoshkov V.I., and Parmuzin E.I.** The new method of ARGO buoys system observation data interpolation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2013. — Vol. 28, № 1. — P. 67–84.