

Modélisation des fonctions de structure dans une assimilation 3D-VAR océanique

Isabelle Mirouze^{1,2} et Anthony T. Weaver¹

¹ CERFACS / SUC URA 1875

² CNRS-UMR 5219

4ème Rencontres Météo-MathAppli.
25 Mars 2009



- 1 Introduction
- 2 L'opérateur de diffusion
- 3 La normalisation
- 4 Conclusion

Formulation incrémentale du 3D-Var

Etat vrai: \mathbf{x}^t

Ebauche: $\mathbf{x}^b = \mathbf{x}^t + \boldsymbol{\varepsilon}^b$ avec $\mathbf{B} = E \left[\boldsymbol{\varepsilon}^b (\boldsymbol{\varepsilon}^b)^T \right] \quad n \times n$

Observations: $\mathbf{y}^o = H(\mathbf{x}^t) + \boldsymbol{\varepsilon}^o$ avec $\mathbf{R} = E \left[\boldsymbol{\varepsilon}^o (\boldsymbol{\varepsilon}^o)^T \right] \quad p \times p$

Opérateur d'observation: H

permet de passer de l'espace du modèle à l'espace des observations

Fonction coût

$$J(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^b)^T \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}^b) + \frac{1}{2}(H(\mathbf{x}) - \mathbf{y}^o)^T \mathbf{R}^{-1}(H(\mathbf{x}) - \mathbf{y}^o)$$

Linéarisation de H au voisinage de \mathbf{x}^b : \mathbf{H}

Incrément: $\delta \mathbf{x} = \mathbf{x} - \mathbf{x}^b$

Innovation: $\mathbf{d} = \mathbf{y}^o - \mathbf{H}\mathbf{x}^b$

Fonction coût incrémentale

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

Les difficultés de la matrice \mathbf{B}

- Difficulté de l'estimation: il n'y a pas assez d'informations
- Problème multivarié: il existe des covariances entre les variables
4 variables 3D: Température, salinité, courant zonal et méridien
1 variable 2D: Hauteur d'eau
- Problème de grande taille: exemples de grilles globales
ORCA2: $182 \times 149 \times 31 \rightarrow n = 3 \cdot 10^6 \Rightarrow n \times n = 10^{13}$
ORCA05: $722 \times 511 \times 31 \rightarrow n = 4 \cdot 10^7 \Rightarrow n \times n = 10^{15}$
ORCA025: $1442 \times 1021 \times 50 \rightarrow n = 3 \cdot 10^8 \Rightarrow n \times n = 10^{17}$
- Garantir une matrice \mathbf{B} symétrique et définie positive: $\mathbf{B} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T$

Les difficultés de la matrice \mathbf{B}

En raison de sa grande taille, la matrice \mathbf{B} ne peut pas être construite et stockée dans son entier.

Espace spectral:

⇒ Hypothèse diagonale dans le cas isotrope

Estimation de \mathbf{B} par une méthode d'ensembles, filtrage par ondelettes ou localisation, ...

Approche souvent utilisée en météorologie

Espace spatial:

⇒ Permet la gestion de frontières

Modélisation de \mathbf{B} par des opérateurs: Filtre récursif, eqn de diffusion, ...

Approche souvent utilisée en océanographie

Minimisation de la fonction coût du 3D-Var

Fonction coût incrémentale

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

Minimisation par méthode itérative \rightarrow accélération de la convergence par préconditionnement: $\mathbf{B} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T$ et $\mathbf{v} = \mathbf{U}^{-1}\delta\mathbf{x} \Rightarrow \delta\mathbf{x} = \mathbf{U}\mathbf{v}$

Nouvelle fonction coût

$$J(\mathbf{v}) = \frac{1}{2}\mathbf{v}^T \mathbf{v} + \frac{1}{2}(\mathbf{H}\mathbf{U}\mathbf{v} - \mathbf{d})^T \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{H}\mathbf{U}\mathbf{v} - \mathbf{d})$$

Résolution par la méthode du gradient conjugué

$$\underbrace{(\mathbf{U}^T \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{U} + \mathbf{I})}_{\mathbf{A}} \mathbf{v} = \underbrace{\mathbf{U}^T \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d}}_{\mathbf{b}}$$

Evaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$

Si $\boldsymbol{\eta}$ est un champ scalaire, comment évaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$?

- Problème multivarié

D'un problème multivarié à plusieurs problèmes univariés (Derber et Bouttier (1999))

Les équations de Navier-Stokes imposent des relations entre les différentes variables:

- Définition d'une variable totale
- Composantes équilibrées: ensemble des contraintes liant les différentes variables du vecteur d'état
- Composantes non équilibrées: toute composante ne pouvant être formulée à travers ces contraintes d'équilibre

Opérateur d'équilibre \mathbf{K}

$$\mathbf{B} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{K}\mathbf{B}_U\mathbf{K}^T$$

\mathbf{B}_U est bloc-diagonale. Chaque bloc correspond aux covariances spatiales d'une variable.

Evaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$

Si $\boldsymbol{\eta}$ est un champ scalaire, comment évaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$?

- Problème multivarié
⇒ L'opérateur d'équilibre \mathbf{K} permet de transformer le problème multivarié en plusieurs problèmes univariés indépendants
- Covariances spatiales d'une variable donnée

Des covariances aux corrélations

\mathbf{B}_U est bloc-diagonale. Chaque bloc correspond aux covariances spatiales d'une variable.

On définit pour chaque bloc

- Les variances \rightarrow matrice diagonale des variances \mathbf{D}
- Les corrélations \rightarrow matrice bloc diagonale des corrélations spatiales \mathbf{C}

Variances et corrélations

$$\mathbf{B}_U = \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{C} \mathbf{D}^{1/2}$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{U} \mathbf{U}^T = \mathbf{K} \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{C} \mathbf{D}^{1/2} \mathbf{K}^T$$

Evaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$

Si $\boldsymbol{\eta}$ est un champ scalaire, comment évaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$?

- Problème multivarié
⇒ L'opérateur d'équilibre \mathbf{K} permet de transformer le problème multivarié en plusieurs problèmes univariés indépendants
- Covariances spatiales d'une variable donné
⇒ Matrice diagonale des variances \mathbf{D} et matrice des corrélations \mathbf{C}
- Problème de grande taille et manque d'information
⇒ Construire \mathbf{C} pour calculer $\mathbf{C}\boldsymbol{\eta}$ → difficile
⇒ Evaluer $\mathbf{C}\boldsymbol{\eta}$ par un opérateur de corrélation

Opérateur de corrélation

E : espace linéaire

E' : espace dual de E

L'opérateur de corrélation \mathcal{C} est une application linéaire, symétrique, définie positive (ou nulle) qui relie E' à E par:

$$\begin{aligned} \mathcal{C} : \quad E' &\longrightarrow E \\ d_e(z) &\longmapsto e(z) = \int_{z_1}^{z_2} C(z, z') d_e(z') dz' \end{aligned}$$

où $C(z, z')$ est une fonction de corrélation, appelée noyau de l'opérateur \mathcal{C} . Si elle ne dépend que de la distance $z - z'$ alors $C(z, z') = C(z - z')$ et l'opérateur \mathcal{C} représente le produit de convolution:

$$d_e(z) \longmapsto e(z) = (C * d_e)(z)$$

Evaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$

Si $\boldsymbol{\eta}$ est un champ scalaire, comment évaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$?

- Problème multivarié
 - ⇒ L'opérateur d'équilibre \mathbf{K} permet de transformer le problème multivarié en plusieurs problèmes univariés indépendants
- Covariances spatiales d'une variable donné
 - ⇒ Matrice diagonale des variances \mathbf{D} et matrice des corrélations \mathbf{C}
- Problème de grande taille et manque d'information
 - ⇒ Construire \mathbf{C} pour calculer $\mathbf{C}\boldsymbol{\eta}$ → difficile
 - ⇒ Evaluer $\mathbf{C}\boldsymbol{\eta}$ par un opérateur de corrélation
- Opérateur de corrélation
 - ⇒ Evaluer les intégrales de la convolution
 - ⇒ Trouver une méthode alternative

Méthode alternative suivant Weaver et Courtier (2001)

Equation de diffusion 1D

$$\frac{\partial \eta}{\partial t}(z, t) - \kappa \frac{\partial^2 \eta}{\partial z^2}(z, t) = 0 \quad \kappa > 0$$

Intégration sur un pseudo-temps $[0, T]$

$$\begin{aligned} \eta(z, T) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi\kappa T}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa T}} \eta(z', 0) dz' \\ &= \frac{1}{\lambda} (g \star \eta(\cdot, 0))(z) \end{aligned}$$

Résoudre l' équation de diffusion 1D sur un pseudo-temps $[0, T]$

+ Multiplier par $\lambda = \sqrt{4\pi\kappa T}$

= Appliquer un opérateur de corrélation dont le noyau est une fonction gaussienne d'échelle $L_g = \sqrt{2\kappa T}$

Méthode alternative suivant Weaver et Courtier (2001)

Discrétisation temporelle de $[0, T]$: M pas Δt

Discrétisation spatiale du domaine \rightarrow grille irrégulière de pas Δz_j

\mathbf{L} : forme matricielle de l'intégration de l'eqn. de diffusion sur $1\Delta t$

\mathbf{W} : matrice diagonale des éléments de la grille spatiale

L'opérateur de diffusion est *autoadjoint* par rapport aux éléments de la grille. On a donc la formulation *symétrique*

$$\mathbf{L}^M \mathbf{W}^{-1} = \mathbf{L}^{M/2} \mathbf{W}^{-1} \left(\mathbf{L}^{M/2} \right)^T$$

Méthode alternative suivant Weaver et Courtier (2001)

Λ : matrice diagonale des facteurs de normalisation

Opérateur de diffusion normalisé

$$\mathbf{C} = \Lambda^{1/2} \mathbf{L}^{M/2} \mathbf{W}^{-1} \left(\mathbf{L}^{M/2} \right)^T \Lambda^{1/2}$$

$$\mathbf{B} = \underbrace{\mathbf{K} \mathbf{D}^{1/2} \Lambda^{1/2} \mathbf{L}^{M/2} \mathbf{W}^{-1/2}}_{\mathbf{U}} \underbrace{\left(\mathbf{K} \mathbf{D}^{1/2} \Lambda^{1/2} \mathbf{L}^{M/2} \mathbf{W}^{-1/2} \right)^T}_{\mathbf{U}^T}$$

Evaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$

Si $\boldsymbol{\eta}$ est un champ scalaire, comment évaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$?

- Problème multivarié
 - ⇒ L'opérateur d'équilibre \mathbf{K} permet de transformer le problème multivarié en plusieurs problèmes univariés indépendants
- Covariances spatiales d'une variable donnée
 - ⇒ Matrice diagonale des variances \mathbf{D} et matrice des corrélations \mathbf{C}
- Problème de grande taille et manque d'information
 - ⇒ Construire \mathbf{C} pour calculer $\mathbf{C}\boldsymbol{\eta}$ → difficile
 - ⇒ Evaluer $\mathbf{C}\boldsymbol{\eta}$ par un opérateur de corrélation
- Opérateur de corrélation
 - ⇒ Evaluer les intégrales de la convolution
 - ⇒ Trouver une méthode alternative
 - Equation de diffusion + normalisation

Evaluer $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ et $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$

$$\mathbf{U} = \mathbf{K}\mathbf{D}^{1/2}\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}\mathbf{L}^{M/2}\mathbf{W}^{-1/2}$$

Si $\boldsymbol{\eta}$ est un champ scalaire, on évalue $\mathbf{U}\boldsymbol{\eta}$ en appliquant successivement à $\boldsymbol{\eta}$

- Multiplication par $\mathbf{W}^{-1/2}$
- Intégration de l'équation de diffusion sur le pseudo-temps $[0, T/2]$
- Normalisation par $\boldsymbol{\Lambda}^{1/2}$
- Multiplication par les écarts-type $\mathbf{D}^{1/2}$
- Application de l'opérateur d'équilibre \mathbf{K}

Pour évaluer $\mathbf{U}^T\boldsymbol{\eta}$, on effectue les mêmes opérations mais dans l'ordre inverse et avec les adjoints des opérateurs.

Opérateur de diffusion 1D explicite / implicite

	Explicite	Implicite
\mathbf{L}^M	$\left[1 + \kappa \Delta t \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]^M$	$\left[1 - \kappa \Delta t \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]^{-M}$
$C(z)$	$e^{-\frac{z^2}{2L^2}}$	$\left[1 + \sum_{j=1}^{M-1} \beta_j \left(\frac{ z }{L}\right)^j\right] e^{-\frac{ z }{L}}$
M	$> (L/\Delta z)^2$	arbitraire
λ	$\sqrt{2\pi} L$	$\frac{2^{2M-1} [(M-1)!]^2}{(2M-2)!} L$

L est fonction de $\kappa \Delta t$.

Fonctions autorégressives

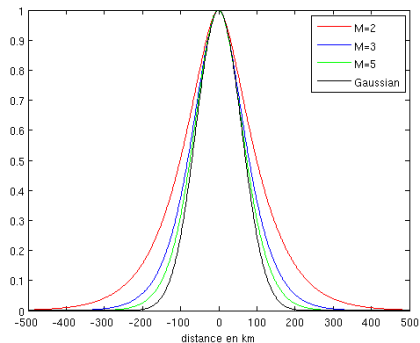


Figure: Fonctions AR

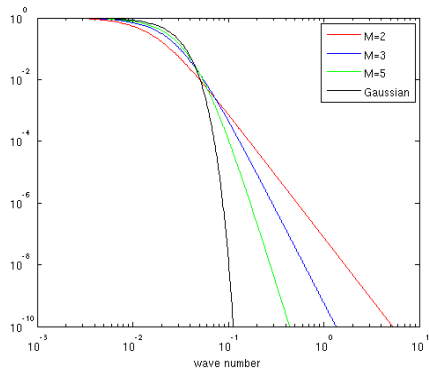


Figure: Spectres normalisés par λ_M

Résolution numérique du schéma implicite

Grille spatiale irrégulière: $\alpha_j = \frac{\kappa \Delta t}{\Delta z_{j-1/2}}$

$$\boldsymbol{\eta}^{m-1} = \mathbf{A}\boldsymbol{\eta}^m$$

$$\eta_j^{m-1} = -\frac{\alpha_{j+1}}{\Delta z_j} \eta_{j+1}^m + \left(1 + \frac{\alpha_{j+1}}{\Delta z_j} + \frac{\alpha_j}{\Delta z_j}\right) \eta_j^m - \frac{\alpha_j}{\Delta z_j} \eta_{j-1}^m$$

\mathbf{A} n'est pas symétrique

$$\Delta z_j \eta_j^{m-1} = -\alpha_{j+1} \eta_{j+1}^m + (\Delta z_j + \alpha_{j+1} + \alpha_j) \eta_j^m - \alpha_j \eta_{j-1}^m$$

$$\mathbf{W}\boldsymbol{\eta}^{m-1} = \mathbf{W}\mathbf{A}\boldsymbol{\eta}^m$$

$\mathbf{W}\mathbf{A}$ est symétrique, définie positive donc inversible

→ Décomposition de Cholesky

La normalisation

Calcul d'un coefficient de normalisation analytique possible:

- schéma explicite: $\lambda = \sqrt{2\pi} L$
- schéma implicite: $\lambda = \frac{2^{2M-1}[(M-1)!]^2}{(2M-2)!} L$

2 questions:

- Le coefficient est-il applicable dans tout le domaine?
→ Conditions aux frontières
- Que se passe-t-il si l'échelle n'est pas constante (inhomogénéité)?

Méthodes de calcul des facteurs de normalisation dans le cas général:

- Méthode exacte
- Méthode par vecteurs aléatoires

Solution gaussienne y compris près des frontières

Conditions de Neumann:

$$\begin{aligned}\eta_N(z, t) &= \left[\frac{1}{l} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2l} e^{-\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \kappa t} \cos\left(\frac{n\pi}{l}(z - z_0)\right) \right] \\ &+ \left[\frac{1}{l} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2l} e^{-\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \kappa t} \cos\left(\frac{n\pi}{l}(z + z_0)\right) \right]\end{aligned}$$

Conditions de Dirichlet:

$$\begin{aligned}\eta_D(z, t) &= \left[\frac{1}{l} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2l} e^{-\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \kappa t} \cos\left(\frac{n\pi}{l}(z - z_0)\right) \right] \\ &- \left[\frac{1}{l} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2l} e^{-\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \kappa t} \cos\left(\frac{n\pi}{l}(z + z_0)\right) \right]\end{aligned}$$

Solution gaussienne:

$$\eta(z, t) = \frac{1}{2}\eta_N(z, t) + \frac{1}{2}\eta_D(z, t)$$

Implémentation de la solution

Pour utiliser $\mathbf{B} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T$ on a défini

$$\mathbf{L}^M \mathbf{W}^{-1} = \mathbf{L}^{M/2} \mathbf{W}^{-1} \left(\mathbf{L}^{M/2} \right)^T$$

Utilisation de $\mathbf{L}^{M/2} \rightarrow$ Matrices rectangulaires.

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^M \mathbf{W}^{-1} &= \frac{1}{2} \mathbf{L}_N^M \mathbf{W}^{-1} + \frac{1}{2} \mathbf{L}_D^M \mathbf{W}^{-1} \\ &= \sqrt{\frac{1}{2}} \mathbf{L}_N^{M/2} \mathbf{W}^{-1} \left(\mathbf{L}_N^{M/2} \right)^T \sqrt{\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{1}{2}} \mathbf{L}_D^{M/2} \mathbf{W}^{-1} \left(\mathbf{L}_D^{M/2} \right)^T \sqrt{\frac{1}{2}} \\ &= \underbrace{\sqrt{\frac{1}{2}} \left(\begin{array}{cc} \mathbf{L}_N^{M/2} & \mathbf{L}_D^{M/2} \end{array} \right)}_{\mathbf{L}^{M/2}} \mathbf{W}^{-1} \underbrace{\left(\begin{array}{c} \left(\mathbf{L}_N^{M/2} \right)^T \\ \left(\mathbf{L}_D^{M/2} \right)^T \end{array} \right)}_{\left(\mathbf{L}^{M/2} \right)^T} \sqrt{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

\Rightarrow Dans la minimisation, la taille du vecteur est multipliée par 2.

Inhomogénéité

Introduction d'inhomogénéité:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t}(z, t) - \kappa \frac{\partial}{\partial z} K(z) \frac{\partial \eta}{\partial z}(z, t) = 0$$

avec $K(z)$ variation adimensionnelle du coefficient de diffusion.

L'opérateur de corrélation dont le noyau local est

$$C_Z(z) = \left[1 + \sum_{j=1}^{M-1} \beta_j \left(\frac{|z|}{LR(Z)} \right)^j \right] e^{-\frac{|z|}{LR(Z)}}$$

est constitué, sous réserve d'une variation "lente", par

- un opérateur de diffusion dont le coefficient de diffusivité κ et sa variation $K(z)$ sont donnés par la relation $LR(z) = \sqrt{\kappa \Delta t K(z)}$
- une normalisation définie en chaque point de grille par $\lambda R(z)$

Conclusion

$$\mathbf{B} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{K}\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{C}\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{K}^T \quad \text{avec} \quad \mathbf{C} = \mathbf{\Lambda}^{1/2}\mathbf{L}^{M/2}\mathbf{W}^{-1}(\mathbf{L}^{M/2})^T\mathbf{\Lambda}^{1/2}$$

Opérateur de diffusion:

Du: *schéma explicite* - facile à coder, coûteux, limité aux gaussiennes.

Au: *schéma implicite* - codage plus difficile, efficace, AR et gaussiennes.

Normalisation:

Du: *méthodes exactes ou aléatoires* - max à 1, déformations, coûteuses.

Au: *coefficients analytiques* - soumis aux erreurs numériques, efficace

- Combinaison de deux diffusions \Rightarrow minimisation plus coûteuse
- Prise en compte de l'inhomogénéité si la variation est "lente"

Implémentation des résultats dans NEMOVAR (système d'assimilation variationnelle pour le modèle océanique NEMO)

- Extensions 2D et 3D dans un contexte réel
- Implémentation d'une méthode d'ensemble pour estimer les covariances (Daget *et al.* 2009)
 - ▶ Des échelles de corrélation (Pannekoucke et Massart 2008)
 - ▶ Des variances \mathbf{D}
- Implémentation d'un algorithme de minimisation qui utilise \mathbf{B} directement plutôt que \mathbf{U} et \mathbf{U}^T

Diffusion 1D dans chaque direction $\mathcal{L} = \mathcal{L}_x \mathcal{L}_y \mathcal{L}_z$:

- $\mathcal{L}_x \rightarrow$ Direction zonale: prise en compte du bouclage Est/Ouest
- $\mathcal{L}_y \rightarrow$ Direction méridienne: recouvrement au Nord
- $\mathcal{L}_z \rightarrow$ Direction verticale

Questions:

- L'approximation est-elle valable?
- Garantir que \mathbf{B} soit symétrique, définie positive \rightarrow Comment définir $\mathbf{L}^M = \mathbf{L}^{M/2} \mathbf{W}^{-1} (\mathbf{L}^{M/2})^T$?
- Environnement massivement parallèle: décomposition en sous-domaines \rightarrow Parallélisation de Cholesky? Autre méthode?
- Association des conditions aux frontières de Neumann et Dirichlet
- La définition des échelles est-elle compatible avec les erreurs numériques ?
- ...

Extensions 2D et 3D

