ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2023, том 63, № 4, с. 657–666

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.6,551.46

ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ФУНКЦИОНАЛОВ ОТ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ВАРИАЦИОННОГО УСВОЕНИЯ К ВХОДНЫМ ДАННЫМ О ПОТОКЕ ТЕПЛА ДЛЯ МОДЕЛИ ТЕРМОДИНАМИКИ МОРЯ[1)]

© 2023 г.
Е. И. Пармузин[1,*], В. П. Шутяев[1,]**

[1] *119333 Москва, ул.Губкина, 8, Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН, Россия*

**e-mail: parm@inm.ras.ru*

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

Поступила в редакцию 29.04.2022 г.
Переработанный вариант 02.11.2022 г.
Принята к публикации 15.12.2022 г.

Для математической модели термодинамики моря, разработанной в Институте вычислительной математики им. Г.И. Марчука РАН, рассматривается задача вариационного усвоения данных наблюдений с целью восстановления потоков тепла на поверхности моря. Исследована чувствительность функционалов от решения к входным данным о потоке тепла в рассматриваемой задаче вариационного усвоения и приведены результаты численных экспериментов для модели динамики Черного моря. Библ. 31. Фиг. 3.

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

DOI: 10.31857/S0044466923040130, **EDN:** IPMMNL

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы методы исследования и численного решения задач вариационного усвоения данных, представляющих собой конкретные задачи оптимального управления, получили большое развитие в метеорологии и океанографии, где данные наблюдений усваиваются в моделях атмосферы и океана с целью получения начальных, граничных условий или других параметров модели для последующего моделирования и прогноза (см. [1–9]).

При исследовании задач вариационного усвоения данных наблюдений важную роль играет анализ чувствительности оптимального решения и его функционалов по отношению к входным данным (см. [10–17]). Настоящая работа обобщает результаты предыдущих работ авторов на случай задачи вариационного усвоения данных с целью восстановления потоков тепла на поверхности моря при одновременном использовании ковариационных матриц ошибок данных наблюдений и ошибок начального приближения (бэкграунда). Проведено исследование чувствительности функционалов от оптимального решения задачи вариационного усвоения данных о температуре поверхности для модели термодинамики моря по отношению к входным данным о потоке тепла. С учетом свойств гессиана функции стоимости доказана теорема о представлении градиента функционала по отношению к данным бэкграунда, сформулирован алгоритм вычисления градиента функционала и приведены результаты численных экспериментов для модели динамики Черного моря, разработанной в ИВМ РАН.

1. ЗАДАЧА ВАРИАЦИОННОГО УСВОЕНИЯ ДАННЫХ ДЛЯ МОДЕЛИ ТЕРМОДИНАМИКИ МОРЯ

Рассмотрим задачу термодинамики моря в виде (см. [18], [19])

[1)]Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 20-11-20057, исследования в разд. 1 и 2), а также при поддержке Отделения Московского центра фундаментальной и прикладной математики в ИВМ РАН (Соглашение с Минобрнауки РФ № 075-15-2022-286).

$$
\begin{gathered}
T_t+(\bar{U},\mathrm{Grad})T-\mathrm{Div}(\hat{a}_T\cdot\mathrm{Grad}\,T)=f_T \quad \text{в} \quad D\times(0,\bar{t}), \quad T=T_0 \quad \text{при} \quad t=0 \quad \text{в} \quad D,\\
-\nu_T\frac{\partial T}{\partial z}=Q \quad \text{на} \quad \Gamma_S\times(0,\bar{t}), \quad \frac{\partial T}{\partial N_T}=0 \quad \text{на} \quad \Gamma_{w,c}\times(0,\bar{t}),\\
\bar{U}_n^{(-)}T+\frac{\partial T}{\partial N_T}=\bar{U}_n^{(-)}d_T+Q_T \quad \text{на} \quad \Gamma_{w,op}\times(0,\bar{t}), \quad \frac{\partial T}{\partial N_T}=0 \quad \text{на} \quad \Gamma_H\times(0,\bar{t}),
\end{gathered} \tag{1.1}
$$

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, $\bar{U}=(u,v,w)$, $\hat{a}_T=\mathrm{diag}((a_T)_{ii})$, $(a_T)_{11}=(a_T)_{22}=\mu_T$, $(a_T)_{33}=\nu_T$, $f_T=f_T(x,y,z,t)$ – заданные функции. Скорости u, v, w зависят в общем случае от пространства и времени, а коэффициенты 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, $\Gamma_{w,op}$, $\Gamma_{w,c}$, Γ_H, где $\Gamma_S=\Omega$ (невозмущенная поверхность моря), $\Gamma_{w,op}$ – жидкая (открытая) часть вертикальной боковой границы, $\Gamma_{w,c}$ – твердая часть вертикальной боковой границы, Γ_H – дно моря. Другие обозначения и детальное описание постановки задачи можно найти в работах [20–22].

Запишем задачу (1.1) в форме операторного уравнения в $\left(W_2^1(D)\right)^*$:

$$
\begin{gathered}
T_t+LT=F+BQ \quad \text{для п.в.} \quad t\in(0,\bar{t}),\\
T=T_0 \quad \text{при} \quad t=0,
\end{gathered} \tag{1.2}
$$

где равенство понимается в обобщенном смысле, а именно,

$$
\left(T_t,\hat{T}\right)+\left(LT,\hat{T}\right)=F\left(\hat{T}\right)+\left(BQ,\hat{T}\right) \quad \forall\hat{T}\in W_2^1(D), \tag{1.3}
$$

а операторы L, F,B определяются интегральными соотношениями

$$
\left(LT,\hat{T}\right)\equiv\int_D\left(-T\,\mathrm{Div}\left(\bar{U}\hat{T}\right)\right)dD+\int_{\Gamma_{w,op}}\bar{U}_n^{(+)}T\hat{T}d\Gamma+\int_D\hat{a}_T\,\mathrm{Grad}(T)\,\mathrm{Grad}\left(\hat{T}\right)dD,
$$

$$
F\left(\hat{T}\right)=\int_{\Gamma_{w,op}}\left(Q_T+\bar{U}_n^{(-)}d_T\right)\hat{T}d\Gamma+\int_D f_T\hat{T}dD,
$$

$$
\left(T_t,\hat{T}\right)=\int_D T_t\hat{T}dD, \quad \left(BQ,\hat{T}\right)=\int_\Omega Q\hat{T}\Big|_{z=0}d\Omega,
$$

при этом функции $\hat{a}_T$, Q_T, f_T, Q таковы, что равенство (1.3) имеет смысл.

Рассмотрим задачу об усвоении данных о температуре поверхности моря, следуя [21], [23]. Предположим, что в задаче (1.1) функция $Q\in L_2(\Omega\times(0,\bar{t}))$ не известна. Пусть задана функция данных наблюдений $T_{\mathrm{obs}}(x,y,t)$ 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 $T\big|_{z=0}$. Считаем, что $T_{\mathrm{obs}}\in L_2(\Omega\times(0,\bar{t}))$. 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,

$$
T_{\mathrm{obs}}=m_0T^t\Big|_{z=0}+\xi_{\mathrm{obs}},
$$

где T^t – точное решение задачи (1.1) при некотором $Q=Q^t$, а $\xi_{\mathrm{obs}}\in Y_{\mathrm{obs}}=L_2\left(\Omega\times(0,\bar{t})\right)$ рассматривается как ошибка наблюдений в пространстве наблюдений Y_{obs}. Предполагается, что ошибки ξ_{obs} случайные и они распределены по нормальному закону (гауссовские) с нулевым математическим ожиданием и ковариационным оператором $R\cdot=E[(\cdot,\xi_{\mathrm{obs}})\xi_{\mathrm{obs}}]$, $R:Y_{\mathrm{obs}}\to Y_{\mathrm{obs}}$, 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 [8]. В дальнейшем мы будем предполагать, что R положительно определен и, значит, обратим.

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

$$\begin{gathered} T_t + LT = F + BQ, \quad t \in (0,\bar{t}), \\ T = T_0 \quad \text{при} \quad t = 0, \\ J(Q) = \inf_Q J(Q), \end{gathered} \tag{1.4}$$

где

$$J(Q) = \frac{1}{2}\int_0^{\bar{t}}\int_\Omega \left(Q - Q^{(0)}\right)\mathcal{B}^{-1}\left(Q - Q^{(0)}\right)d\Omega dt + \frac{1}{2}\int_0^{\bar{t}}\int_\Omega \left(m_0 T\big|_{z=0} - T_{\text{obs}}\right)R^{-1}(m_0 T\big|_{z=0} - T_{\text{obs}})d\Omega dt,$$

$Q^{(0)} = Q^{(0)}(x,y,t)$ – заданная функция, $\mathcal{B}: Y_{\text{obs}} \to Y_{\text{obs}}$ – ковариационный оператор ошибок бэкграунда. Функция $Q^{(0)}$ обычно выбирается в качестве начального приближения для неизвестного потока Q (так называемый бэкграунд или фоновый поток). Цель вариационного усвоения данных – используя $Q^{(0)}$, найти лучшую оценку для Q, согласованную с решением модели и наблюдениями для дальнейшего моделирования и прогноза.

Слагаемое с весовым оператором $\mathcal{B}^{-1}$ играет роль регуляризации по Тихонову (см. [24]), он считается заданным при рассмотрении задачи. Если оператор $\mathcal{B}$ положительно определен, то поставленная задача вариационного усвоения данных имеет единственное решение. Существование оптимального решения следует из классических результатов теории экстремальных задач (см. [2]), так как можно показать, что решение задачи (1.2) непрерывно зависит от 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 (см. [2]):

$$\begin{gathered} T_t + LT = F + BQ, \quad t \in (0,\bar{t}), \\ T = T_0 \quad \text{при} \quad t = 0, \end{gathered} \tag{1.5}$$

$$\begin{gathered} -(T^*)_t + L^*T^* = BR^{-1}m_0\left(B^*T - T_{\text{obs}}\right), \quad t \in (0,\bar{t}), \\ T^* = 0 \quad \text{при} \quad t = \bar{t}, \end{gathered} \tag{1.6}$$

$$\mathcal{B}^{-1}\left(Q - Q^{(0)}\right) + B^*T^* = 0 \quad \text{на} \quad \Omega\times(0,\bar{t}), \tag{1.7}$$

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

2. ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ К ДАННЫМ О ПОТОКЕ ТЕПЛА

Рассмотрим функцию $G(T,Q)$, зависящую от T, Q, которая предполагается вещественнозначной и может рассматриваться как функционал на $X = L_2(D\times(0,\bar{t}))\times L_2(\Omega\times(0,\bar{t}))$. Нас интересует чувствительность функционала $G(T,Q)$ к данным бэкграунда $Q^{(0)}$ при условии, что T, Q получены после вариационного усвоения из системы оптимальности (1.5)–(1.7). Как известно из [1], [25], чувствительность функционала определяется градиентом по $Q^{(0)}$, который является производной Гато:

$$\frac{dG}{dQ^{(0)}} = \frac{\partial G}{\partial T}\frac{\partial T}{\partial Q^{(0)}} + \frac{\partial G}{\partial Q}\frac{\partial Q}{\partial Q^{(0)}}. \tag{2.1}$$

Обозначим через $\delta Q^{(0)}$ вариацию функции $Q^{(0)}$. Из (1.5)–(1.7) выводим систему оптимальности для вариаций:

$$\begin{gathered} \delta T_t + L\delta T = B\delta Q, \quad t \in (0,\bar{t}), \\ \delta T = 0 \quad \text{при} \quad t = 0, \end{gathered} \tag{2.2}$$

$$
\begin{gathered}
-\left(\delta T^*\right)_t + L^*\delta T^* = BR^{-1}m_0B^*\delta T, \quad t \in (0,\bar{t}), \\
\delta T^* = 0 \quad \text{при} \quad t = \bar{t},
\end{gathered} \tag{2.3}
$$

$$
\mathcal{B}^{-1}\left(\delta Q - \delta Q^{(0)}\right) + B^*\delta T^* = 0 \quad \text{на} \quad \Omega \times (0,\bar{t}). \tag{2.4}
$$

Отметим, что данные наблюдений T_{obs} уже не входят в систему (2.2)–(2.4), в отличие от (1.5)–(1.7). Система (2.2)–(2.4) эквивалентна следующей задаче усвоения данных для определения $\delta T, \delta Q$ таких, что

$$
\begin{gathered}
\delta T_t + L\delta T = B\delta Q, \quad t \in (0,\bar{t}), \\
\delta T = 0 \quad \text{при} \quad t = 0, \\
S(\delta Q) = \inf_Q S(Q),
\end{gathered} \tag{2.5}
$$

где

$$
S(\delta Q) = \frac{1}{2}\int_0^{\bar{t}}\int_\Omega \left(\delta Q - \delta Q^{(0)}\right)\mathcal{B}^{-1}\left(\delta Q - \delta Q^{(0)}\right)d\Omega dt + \frac{1}{2}\int_0^{\bar{t}}\int_\Omega m_0\delta T\big|_{z=0} R^{-1}\delta T\big|_{z=0}\, d\Omega dt. \tag{2.6}
$$

Справедлива

Лемма 1. *Гессиан* $\mathcal{H}$ *функционала* (2.6) *определяется на* $v \in L_2(\Omega \times (0,\bar{t}))$ *последовательным решением задач*

$$
\begin{gathered}
\psi_t + L\psi = Bv, \quad t \in (0,\bar{t}), \\
\psi = 0 \quad \textit{при} \quad t = 0,
\end{gathered} \tag{2.7}
$$

$$
\begin{gathered}
-\left(\psi^*\right)_t + L^*\psi^* = BR^{-1}m_0B^*\psi, \quad t \in (0,\bar{t}), \\
\psi^* = 0 \quad \textit{при} \quad t = \bar{t},
\end{gathered} \tag{2.8}
$$

$$
\mathcal{H}v = \mathcal{B}^{-1}v + B^*\psi^*. \tag{2.9}
$$

Доказательство. Согласно системе оптимальности (2.2)–(2.4), градиент функционала (2.6) определяется по формуле

$$
\operatorname{grad} S = \mathcal{B}^{-1}\left(\delta Q - \delta Q^{(0)}\right) + B^*\delta T^*,
$$

где δT^* – решение сопряженной задачи (2.3). Продифференцируем последнюю формулу еще раз по δQ, чтобы получить правило действия гессиана:

$$
\mathcal{H}v = \mathcal{B}^{-1}v + B^*\psi^*,
$$

где v – вариация δQ, а ψ^* – решение сопряженной задачи (2.8), которая есть не что иное, как продифференцированная задача (2.3). При этом ψ – решение задачи (2.7), которая получена из (2.2) дифференцированием по δQ. Лемма доказана.

Используя (2.7)–(2.9), нетрудно видеть (см. [26]), что система (2.2)–(2.4) эквивалентна уравнению для вариации оптимального решения δQ:

$$
\mathcal{H}\delta Q = \mathcal{B}^{-1}\delta Q^{(0)}. \tag{2.10}
$$

Гессиан $\mathcal{H}$ действует в $L_2(\Omega \times (0,\bar{t}))$ с областью определения $D(\mathcal{H}) = L_2(\Omega \times (0,\bar{t}))$, он ограничен, самосопряжен и неотрицательно определен. Если $\mathcal{B}^{-1}$ положительно определен, то $\mathcal{H}$ положительно определен, поскольку $(\mathcal{H}v, v) \geq \left(\mathcal{B}^{-1}v, v\right)$. В последнем случае уравнение (2.10) имеет единственное решение

$$
\delta Q = \mathcal{H}^{-1}\mathcal{B}^{-1}\delta Q^{(0)}. \tag{2.11}
$$

Формула (2.11) дает в явном виде выражение для вариаций оптимального решения δQ через вариацию функции начального приближения (бэкграунда) $\delta Q^{(0)}$. Уравнение вида (2.11) может быть положено в основу исследования чувствительности оптимального решения и его функционалов к ошибкам бэкграунда.

Справедлива

Теорема 1. *Градиент функционала* $G(T,Q)$ *по* $Q^{(0)}$ *имеет вид*

$$\frac{dG}{dQ^{(0)}} = \mathcal{B}^{-1}\mathcal{H}^{-1}\mathcal{F}, \tag{2.12}$$

где

$$\mathcal{F} = B^*\,\phi^* + \frac{\partial G}{\partial Q}, \tag{2.13}$$

$\mathcal{H}$ *— гессиан, определенный формулами* (2.7)–(2.9), *а* ϕ^* *— решение сопряженной задачи*

$$\begin{gathered} -\left(\phi^*\right)_t + L^*\phi^* = \frac{\partial G}{\partial T}, \quad t \in \left(0,\bar{t}\,\right), \\ \phi^* = 0 \quad \textit{при} \quad t = \bar{t}. \end{gathered} \tag{2.14}$$

Доказательство. Рассмотрим значение градиента (2.1) на вариации $\delta Q^{(0)}$:

$$\left(\frac{dG}{dQ^{(0)}}, \delta Q^{(0)}\right)_{Y_{\text{obs}}} = \left(\frac{\partial G}{\partial T}, \delta T\right)_Y + \left(\frac{\partial G}{\partial Q}, \delta Q\right)_{Y_{\text{obs}}}, \tag{2.15}$$

где $\delta Q^{(0)}$ – вариация функции $Q^{(0)}$, $\delta T = \dfrac{\partial T}{\partial Q^{(0)}}\delta Q^{(0)}$, $\delta Q = \dfrac{\partial Q}{\partial Q^{(0)}}\delta Q^{(0)}$ – решения системы (2.2)–(2.4), $Y = L_2\left(D\times\left(0,\bar{t}\,\right)\right)$.

Задача (2.14) является сопряженной по отношению к (2.2), поэтому в силу соотношения сопряженности

$$\left(\frac{\partial G}{\partial T}, \delta T\right)_Y = \left(\phi^*, B\delta Q\right)_Y = (B^*\,\phi^*, \delta Q)_{Y_{\text{obs}}}. \tag{2.16}$$

Из (2.15)–(2.16) получаем

$$\left(\frac{dG}{dQ^{(0)}}, \delta Q^{(0)}\right)_{Y_{\text{obs}}} = \left(B^*\phi^* + \frac{\partial G}{\partial Q}, \delta Q\right)_{Y_{\text{obs}}} = (\mathcal{F}, \delta Q)_{Y_{\text{obs}}}, \tag{2.17}$$

где $\mathcal{F}$ определяется по формуле (2.13).

Уравнение для δQ определяется формулой (2.11), отсюда

$$(\mathcal{F}, \delta Q)_{Y_{\text{obs}}} = \left(\mathcal{F}, \mathcal{H}^{-1}\mathcal{B}^{-1}\delta Q^{(0)}\right)_{Y_{\text{obs}}} = \left(\mathcal{B}^{-1}\mathcal{H}^{-1}\mathcal{F}, \delta Q^{(0)}\right)_{Y_{\text{obs}}}. \tag{2.18}$$

Таким образом, из (2.15)–(2.18) заключаем, что

$$\left(\frac{dG}{dQ^{(0)}}, \delta Q^{(0)}\right)_{Y_{\text{obs}}} = \left(\mathcal{B}^{-1}\mathcal{H}^{-1}\mathcal{F}, \delta Q^{(0)}\right)_{Y_{\text{obs}}}, \tag{2.19}$$

откуда следует утверждение теоремы.

Реальное (практическое) использование теоремы 1 может быть сформулировано в виде следующего алгоритма для вычисления градиента функционала. Градиент $dG/dQ^{(0)}$ определяется последовательным выполнением следующих шагов:

1) решить сопряженную задачу

$$\begin{gathered} -\left(\phi^*\right)_t + L^*\phi^* = \frac{\partial G}{\partial T}, \quad t \in (0,\bar{t}\,), \\ \phi^* = 0 \quad \text{при} \quad t = \bar{t}, \end{gathered} \tag{2.20}$$

полагая

$$\mathcal{F} = B^*\phi^* + \frac{\partial G}{\partial Q};$$

2) найти u как решение уравнения с гессианом

$$\mathcal{H}u = \mathcal{F}; \tag{2.21}$$

3) вычислить градиент функционала по формуле

$$\frac{dG}{dQ^{(0)}} = \mathcal{B}^{-1}u. \tag{2.22}$$

Алгоритм (2.20)–(2.22) с учетом конкретного вида производных $\partial G/\partial T$, $\partial G/\partial Q$ использовался при численных расчетах для оценки чувствительности функционалов, связанных с температурой после усвоения данных наблюдений, по отношению к изменениям функции бэкграунда $Q^{(0)}$.

Отметим, что в процессе отыскания градиента функционала нет необходимости вычислять обратный гессиан $\mathcal{H}^{-1}$, который фигурирует в (2.12), достаточно просто решить задачу $\mathcal{H}u = \mathcal{F}$ вида (2.21), например, итерационным методом.

Отметим также, что данные наблюдений T_{obs} предполагаются случайными величинами, их случайность учитывается в функции стоимости $J(Q)$ через ковариационный оператор R, который входит в дальнейшем в определение гессиана (2.7)–(2.9).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Численные эксперименты проводились с использованием трехмерной численной модели гидротермодинамики Черного и Азовского морей, разработанной в ИВМ РАН на основе метода расщепления (см. [22]) и дополненной процедурой усвоения температуры поверхности моря (ТПМ) для восстановления тепловых потоков Q с учетом ковариационных матриц ошибок наблюдений и ошибок бэкграунда.

Объектом моделирования является акватория Черного и Азовского морей. Параметры рассматриваемой области и ее географические координаты можно описать следующим образом: σ-сетка $306 \times 200 \times 27$ (широта, долгота и глубина соответственно). Первая точка "сетки С" (см. [27]) имеет координаты 26.65° E и 40.15° N. Шаги сетки по x и y постоянны и равны 0.05 и 0.036 градуса соответственно. Шаг по времени равен $\Delta t = 2.5$ мин.

Данные наблюдений ТПМ предоставлены спутниковой службой "See the Sea", входящей в состав ЦКП "ИКИ Мониторинг", которая занимается сбором и обработкой различных данных о состоянии земной поверхности и ориентируется на работу со спутниковыми наблюдениями (см. [28]). В качестве T_{obs} в данном эксперименте были выбраны данные ТПМ спектрометра VIIRS на спутнике SNPP и спектрометра MODIS на спутнике Aqua (несколько измерений в сутки в определенные моменты времени). Данные ТПМ за период с 1 января по 30 июня 2019 г. были пересчитаны на сетку численной модели (см. [29]). Для расчета атмосферного воздействия в модели использовались метеорологические характеристики, в том числе, балк-формулы для расчета турбулентных течений на поверхности моря. Рассчитанные таким же образом значения среднего климатического теплового потока $Q^{(0)}$ использовались в процедуре усвоения данных в качестве начального приближения (бэкграунда).

Для расчета диагональных элементов ковариационной матрицы $\mathcal{B}$ были получены данные о тепловом потоке на поверхности моря. Поток тепла на поверхности моря рассчитан по данным реанализа Era 5 (www.ecmwf.int/en/forecasts/datasets/reanalysis-datasets/era5) (см. [30]) за период с 1979 по 2020 г. Данные Era 5 загружались с временным разрешением 12 ч, что позволяет учитывать суточный ход изменений, разделять дневные и ночные потоки тепла. По данным за 1979–2020 гг. рассчитаны средние значения и дисперсии теплового потока по дневным и ночным данным для каждого дня года. Полученные дисперсии представляют собой диагональные элементы ковариационной матрицы ошибок бэкграунда $\mathcal{B}$. Аналогичным образом (см. [31]) на основе данных сервиса Copernicus (период с 1982 по 2019 г.) и данных ЦКП "ИКИ Мониторинг" о температуре поверхности моря рассчитывались элементы ковариационной матрицы ошибок данных наблюдений R.

В численных примерах рассматривались функционалы вида

$$G(T,Q) = \int_0^{\bar{t}} dt \int_\Omega F^*(x,y,t)T(x,y,0,t)d\Omega, \tag{3.1}$$

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

$$F^*(x,y,t) = \begin{cases} 1/(\tau \operatorname{mes}\omega), & \text{если} \quad (x,y) \in \omega, \quad t_1 - \tau \le t \le t_1, \\ 0 & \text{в противном случае,} \end{cases} \tag{3.2}$$

где $\operatorname{mes}\omega$ означает площадь района ω. В этом случае функционал (3.1) представляется в виде

$$G(T,Q) = \frac{1}{\tau}\int_{t_1-\tau}^{t_1} dt \left(\frac{1}{\operatorname{mes}\omega}\int_\omega T(x,y,0,t)d\Omega\right). \tag{3.3}$$

С использованием обозначений, введенных выше, функционал (3.1) записывается в виде скалярного произведения

$$G(T,Q) = \int_0^{\bar{t}} \left(BF^*,T\right)dt = (BF^*,T)_Y, \quad Y = L_2\left(D\times(0,\bar{t})\right).$$

В силу

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

производные от G по T,Q, входящие в (2.20)–(2.22), определяются по формулам

$$\frac{\partial G}{\partial T} = BF^*, \quad \frac{\partial G}{\partial Q} = 0. \tag{3.4}$$

Приведем результаты численных расчетов. При реализации алгоритма усвоения данных использовалась система (1.5)–(1.7). Расчет чувствительности выбранного функционала происходил на одном шаге по времени (t_k,t_{k+1}), где $t_{k+1} = \bar{t} = t_k + \Delta t$. На каждом из таких шагов была рассчитана чувствительность функционала к данным бэкграунда. Были выбраны два момента времени для расчета чувствительности функционала к данным бэкграунда: 31 мая 2019 г. 10 ч 25 мин (86 655 временных шагов модели) и 1 июля 2019 г. 23 ч 30 мин (104 820 временных шагов модели). Выбор данных моментов времени обусловлен тем, что в эти моменты времени данные со спутников покрывали почти всю исследуемую акваторию Черного и Азовского морей.

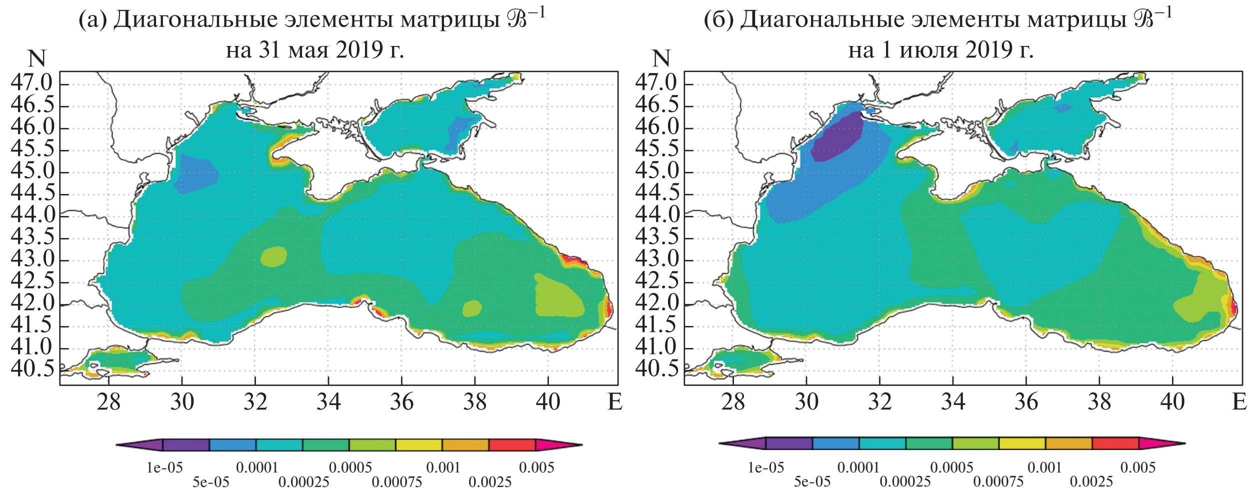
На фиг. 1 представлены значения диагональных элементов матрицы $\mathcal{B}^{-1}$ в разные моменты времени. Так, диагональные элементы, рассчитанные на 31 мая 2019 г., показаны на фиг. 1а, а 1 июля 2019 г. – на фиг. 1б.

Значения диагональных элементов R^{-1} на эти же даты приведены на фиг. 2. Результаты расчета чувствительности к данным бэкграунда для 31 мая и 1 июля 2019 г. представлены на фиг. 3а и 3б соответственно, где даны градиенты функции отклика в разные моменты времени.

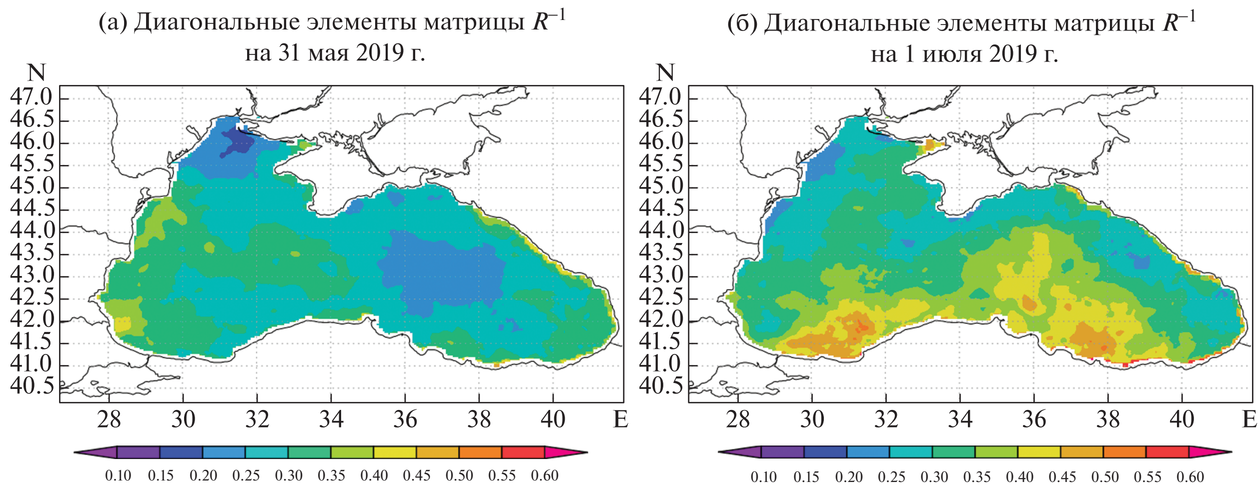
Стоит отметить, что результаты, полученные в эксперименте в рассматриваемые моменты времени, не сильно отличаются друг от друга. Характерной особенностью является малая чувствительность функционала к данным бэкграунда в центральной, наиболее глубокой, области Черного моря. В областях с меньшей глубиной прослеживается возрастание чувствительности, которая принимает максимальные значения в некоторых точках на границе области как в Черном, так и в Азовском морях.

В целом чувствительность рассматриваемого функционала к данным бэкграунда намного меньше, чем чувствительность к данным наблюдений, исследованная в [23].

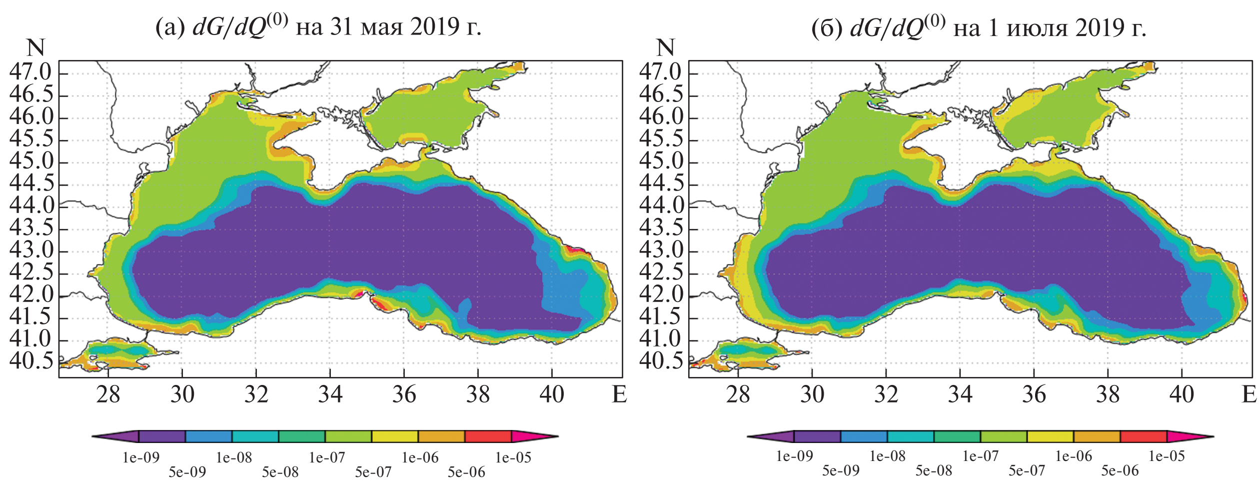
Этот результат подтверждается прямым вычислением функционала $G(T,Q)$ в соответствии с (3.3), полученным после вариационного усвоения, путем введения возмущений в данные бэкграунда $Q^{(0)}$, следуя работе [23].



Фиг. 1. Значения диагональных элементов матрицы $\mathcal{B}^{-1}$ в численном эксперименте для различных моментов времени.



Фиг. 2. Значения диагональных элементов матрицы R^{-1} в численном эксперименте для различных моментов времени.



Фиг. 3. Градиент функционала $G(T, Q)$ в различные моменты времени.

Таким образом, сформулированный алгоритм (2.20)–(2.22) позволяет оценивать чувствительность функционалов, связанных с температурой поверхности моря после усвоения, по отношению к ошибкам данных бэкграунда.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С использованием трехмерной модели гидротермодинамики Черного моря, разработанной в ИВМ РАН, в настоящей работе проведено исследование чувствительности функционалов от решения задачи вариационного усвоения данных с восстановлением потоков тепла на поверхности моря. Разработанный алгоритм позволяет вычислять градиенты функционалов от решения задачи после усвоения по отношению к входным данным о потоке тепла. Вычисление градиента функционала требует однократного решения уравнения с гессианом функции стоимости и решения сопряженной задачи. Для решения этого уравнения нет необходимости вычислять обратный гессиан в явном виде, тем не менее, было бы интересно в будущем провести аналитические оценки обратного гессиана, например, через собственные значения, и использовать их для оценки чувствительности. Численные эксперименты для модели динамики Черного 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 исходных данных бэкграунда при использовании процедуры вариационного усвоения, в том числе в случаях, когда значения этих возмущений заранее не известны.

Авторы благодарны рецензенту за полезные замечания, которые позволили улучшить представление результатов и изложение материала в статье.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Marchuk G.I.* Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. Dordrecht: Kluwer, 1995.
2. *Lions J.L.* Contrôle optimal des systèmes gouvernés par des équations aux dérivos partielles. Paris: Dunod, 1968.
3. *Sasaki Y.K.* An objective analysis based on the variational method // J. Meteor. Soc. Japan. 1958. V. 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. 1986. V. 38A. 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., Martin M., Vidard A.* NEMOVAR: a variational data assimilation system for the NEMO ocean model // ECMWF Technical Memorandum. 2009. No. 120.
9. *Пененко А.В.* Математическое моделирование процессов адвекции-диффузии-реакции с усвоением данных наблюдений и решением обратных задач. Автореф. дисс. ... докт. физ.-матем. наук. Новосибирск: ИВМ и МГ СО РАН, 2021.
10. *Le Dimet F.-X., Ngodock H.E., Luong B., Verron J.* Sensitivity analysis in variational data assimilation // J. Meteorol. Soc. Japan. 1997. V. 75 (1B). P. 245–255.
11. *Le Dimet F.-X., Navon I.M., Daescu D.N.* Second-order information in data assimilation // Month. Wea. Rev. 2002. V. 130 (3). P. 629–648.
12. *Le Dimet F.-X., Shutyaev V.* On deterministic error analysis in variational data assimilation // Nonlin. Process. Geophys. 2005. V. 12. P. 481–490.
13. *Gejadze I., Le Dimet F.-X., Shutyaev V.P.* On analysis error covariances in variational data assimilation // SIAM J. Sci. Comput. 2008. V. 30. No. 4. P. 1847–1874.
14. *Gejadze I., Le Dimet F.-X., Shutyaev V.P.* On optimal solution error covariances in variational data assimilation problems // J. Comp. Phys. 2010. V. 229. P. 2159–2178.
15. *Gejadze I., Shutyaev V.P., Le Dimet F.-X.* Analysis error covariance versus posterior covariance in variational data assimilation // Q. J. R. Meteorol. Soc. 2013. V. 139. P. 1826–1841.
16. *Агошков В.И., Пармузин Е.И., Шутяев В.П.* Ассимиляция данных наблюдений в задаче циркуляции Черного моря и анализ чувствительности ее решения // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2013. Т. 49. № 6. С. 643–654.
17. *Шутяев В.П., Ле Диме Ф.* Чувствительность функционалов задач вариационного усвоения данных // Докл. АН. Математика. 2019. Т. 486. № 4. С. 421–425.

18. *Алексеев В.В., Залесный В.Б.* Численная модель крупномасштабной динамики океана / Вычислительные процессы и системы. М.: Наука, 1993. С. 232–253.
19. *Марчук Г.И., Дымников В.П., Залесный В.Б.* Математические модели в геофизической гидродинамике и численные методы их реализации. Л.: Гидрометеоиздат, 1987.
20. *Agoshkov V.I., Gusev A.V., Diansky N.A., 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. V. 22 (2). P. 133–161.
21. *Агошков В.И., Пармузин Е.И., Шутяев В.П.* Численный алгоритм вариационной ассимиляции данных наблюдений о температуре поверхности океана // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2008. Т. 48. № 8. С. 1371–1391.
22. *Zalesny V.B., Diansky N.A., Fomin V.V., Moshonkin S.N., Demyshev S.G.* Numerical model of the circulation of the Black Sea and the Sea of Azov // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 2012. V. 27. No. 1. P. 95–112.
23. *Shutyaev V., Parmuzin E., Gejadze I.* Stability analysis of functionals in variational data assimilation with respect to uncertainties of input data for a sea thermodynamics model // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 2021. V. 36. No. 6. P. 347–357.
24. *Тихонов А.Н.* О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации // ДАН СССР. 1963. Т. 151. No. 3. P. 501–504.
25. *Cacuci D.G.* Sensitivity theory for nonlinear systems: II.Extensions to additional classes of responses // J. Math. Phys. 1981. V. 22. P. 2803–2812.
26. *Шутяев В.П.* Операторы управления и итерационные алгоритмы в задачах вариационного усвоения данных. М.: Наука, 2001.
27. *Diansky N.A., Bagno A.V., Zalesny V.B.* Sigma model of global ocean circulation and its sensitivity to variations in wind stress // Izv. Atmos. Ocean. Phys. 2002. V. 38. No. 4. P. 477–494.
28. *Лупян Е.А., Матвеев А.А., Уваров И.А., Бочарова Т.Ю., Лаврова О.Ю., Митягина М.И.* Спутниковый сервис See the Sea – инструмент для изучения процессов и явлений на поверхности океана // Совр. пробл. дистанционного зондирования Земли из космоса. 2012. Т. 9. № 2. С. 251–261.
29. *Zakharova N.B., Agoshkov V.I., Parmuzin E.I.* The new method of ARGO buoys system observation data interpolation // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 2013. V. 28. No. 1. P. 67–84.
30. *Hersbach H. et al.* The ERA5 global reanalysis // Q. J. R. Meteorol. Soc. 2020. V. 146. P. 1999–2049.
31. *Агошков В.И., Шутяев В.П., Пармузин Е.И., Захарова Н.Б., Шелопут Т.О., Лезина Н.Р.* Вариационная ассимиляция данных наблюдений в математической модели динамики Черного моря // Морской гидрофиз. журн. 2019. Т. 35. № 6. С. 585–599.