

基于对偶数理论的资料同化新方法

曹小群 皇群博 刘柏年 朱孟斌 余意

A new data assimilation method based on dual-number theory

Cao Xiao-Qun Huang Qun-Bo Liu Bai-Nian Zhu Meng-Bin Yu Yi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 130502 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.130502

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.130502>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I13>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

两级式光伏并网逆变器建模与非线性动力学行为研究

Numerical modeling and research on nonlinear dynamic behaviors of two-stage photovoltaic grid-connected inverter

物理学报.2015, 64(13): 130503 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.130503>

一类可变禁区的不连续系统的加周期分岔

Period-adding bifurcations in a discontinuous system with a variable gap

物理学报.2015, 64(12): 120502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.120502>

Duffing 系统随机相位抑制混沌与随机共振并存现象的机理研究

Mechanism for the coexistence phenomenon of random phase suppressing chaos and stochastic resonance in Duffing system

物理学报.2015, 64(10): 100501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.100501>

太赫兹场和倾斜磁场对超晶格电子动力学特性调控规律研究

Nonlinear electron transport in superlattice driven by a terahertz field and a tilted magnetic field

物理学报.2015, 64(9): 090502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.090502>

一种基于人工蜂群算法的混沌信号盲分离方法

A blind source separation method for chaotic signals based on artificial bee colony algorithm

物理学报.2015, 64(9): 090501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.090501>

基于对偶数理论的资料同化新方法*

曹小群^{1)2)3)†} 皇群博¹⁾ 刘柏年¹⁾ 朱孟斌¹⁾ 余意¹⁾

1) (国防科学技术大学计算机学院, 长沙 410073)

2) (国防科学技术大学海洋科学与工程研究院, 长沙 410073)

3) (国防科学技术大学计算机学院并行与分布处理重点实验室, 长沙 410073)

(2014年10月26日收到; 2015年1月30日收到修改稿)

针对变分资料同化中目标泛函梯度计算精度不高且复杂等问题, 提出了一种基于对偶数理论的资料同化新方法, 主要优点是: 能避免复杂的伴随模式开发及其逆向积分, 只需在对偶数空间通过正向积分就能同时计算出目标泛函和梯度向量的值. 首先利用对偶数理论把梯度分析过程转换为对偶数空间中目标泛函计算过程, 简单、高效和高精度地获得梯度向量值; 其次结合典型的最优化方法, 给出了非线性物理系统资料同化问题的新求解算法; 最后对 Lorenz 63 混沌系统、包含开关的不可微物理模型和抛物型偏微分方程分别进行了资料同化数值实验, 结果表明: 新方法能有效和准确地估计出预报模式的初始条件或物理参数值.

关键词: 资料同化, 对偶数理论, 梯度分析, 最优化

PACS: 05.45.-a, 02.30.Zz, 02.60.Pn

DOI: 10.7498/aps.64.130502

1 引言

资料同化是一种将时空上非规则分布的多源观测数据融合到基于物理规律的数值预报模式中的分析方法, 目的是通过有效利用可获得的一切信息 (包括观测资料、背景场、模式以及相应的误差统计量等) 为非线性动力预报系统提供最优初边值条件^[1-5]. 资料同化在大气、海洋、电离层、非线性动力系统和流体等科学领域具有广泛应用, 对其方法的研究具有重要价值^[6-8]. 目前先进的同化方法主要分为两大类: 一类是顺序资料同化方法^[3], 另一类是变分资料同化方法^[4-8]. 主要的顺序同化方法有: 卡尔曼滤波 (KF)、变形卡尔曼滤波、集合卡尔曼滤波 (EnKF) 和粒子滤波等. 而变分同化方法主要包括三维和四维变分资料同化方法 (3D/4D-Var), 后者是前者在时间维上的扩展且效果更好. 4D-Var 是目前国际上气象和海洋预报业务部门所使用的最先进同化方法, 在提高数值预报准确度方面取得了巨大成功. 4D-Var 本质上是

一个以常/偏微分方程为约束条件的大规模最优化问题, 在求解时需要向最优化算法同时提供目标函数及其梯度向量的数值, 可通过正向积分非线性动力预报模式和逆向积分伴随模式^[9,10]的方式分别计算获得. 为了减少计算代价, 采用多增量方法求解 4D-Var 问题时还需要引入切线性模式. 切线性和伴随模式本质上是非线性物理系统正模式所对应的一阶微分模式, 基于手工方法开发包含完整动力和物理过程复杂预报模型的微分模式是一项非常繁杂和易于出错的工作^[9,10]. 而自动微分工具目前仍然无法产生完美无缺的微分模式, 同时存在计算效率低和存储量大等问题^[9,10].

实际上在变分资料同化、敏感性分析、反问题数值解、非线性最优化以及非线性物理系统可预报性研究等大规模科学和工程计算中, 计算目标泛函关于控制变量或未知参数的一阶 (甚至二阶) 导数值是需要解决的共性基本问题. 通常, 目标泛函与未知参数之间存在复杂的非线性关系, 两者通过常微分方程或偏微分方程组相联系. 除了极少数特殊

* 国家自然科学基金 (批准号: 41475094, 41105063, 41375105) 和高分青年创新基金 (批准号: GFZX04060103-5-19) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: caoxiaoqun@nudt.edu.cn

情形, 通常无法解析计算隐式函数的偏导数, 可行的办法是求数值解. 常用偏导数数值计算方法是差分法, 但如何选择合适的差分步长是一个问题. 另外, 对于高维问题差分法计算代价远远大于伴随方法^[10]. 为了高精度地计算函数导数信息, Lyness 和 Moler 提出了复变量求导法 (CVD)^[11], 主要思想是把导数计算过程转化为复数域函数值计算过程, 优点是计算精度能超过计算机硬件精度. Martins 等^[12,13] 将 CVD 方法应用于航天飞行器结构的优化问题. Gao^[14] 和 Guo^[15] 成功地将 CVD 方法分别应用于复杂结构的三维边界元计算和弹塑性参数反演问题. Cao 和 Song 等^[7] 提出了基于 CVD 的资料同化新方法, 验证了该方法不但适应于一般非线性动力系统, 而且对求解包含开关的不可微预报模式资料同化问题同样有效, 缺点是对每个未知变量都需要独立地积分一次数值模式, 因此对于实际大型问题计算代价无法承受.

本文针对以非线性动力系统为约束条件的最优化问题中目标泛函梯度计算困难的问题, 提出了一种具有较大潜力的基于对偶数理论的资料同化新方法. 通过在对偶数空间中数值求解微分方程和计算目标泛函后能同时高精度地计算出泛函及其梯度向量值, 即不需要额外开发伴随模式, 因此优于常用的基于伴随方程的变分资料同化方法. 因为不需要针对每个未知参数独立地对数值预报模式进行一次正向积分, 所以在计算代价上新方法优于基于复数域微分的资料同化方法. 首先利用对偶数自动微分方法把隐式目标泛函的求导过程转化为对偶数空间中目标泛函正向计算过程, 并且高精度地计算出梯度向量; 其次利用目标泛函梯度信息, 结合经典的最优化方法, 给出了非线性动力系统资料同化问题求解新算法; 然后在数值试验中通过一个非线性海-气耦合振子模型说明了基于对偶数理论新方法计算导数信息的优越性; 最后针对 Lorenz 63 混沌系统、包含不可微开关的单格点比湿发展方程和一维抛物型偏微分方程的资料同化进行了数值实验, 实验结果表明该方法能够非常有效地估计出相应物理模型的初始条件或未知参数.

2 基于对偶数理论的资料同化

2.1 对偶数概念介绍

变分资料同化中通过伴随方程逆向积分以计算目标泛函梯度向量值, 而伴随方程本质上描述的

是目标泛函关于观测量的梯度信息从观测空间传递到模式状态空间, 再在模式状态空间中逆向传播的过程. 在数学上伴随空间是原空间的对偶空间, 伴随状态量处在模式状态量空间的对偶空间中, 即模式状态向量和伴随状态向量之间存在对偶关系. 对偶空间具有一些更良好的性质, 例如, 在模式状态空间较难给出明确表达式的目标泛函梯度向量在伴随空间中具有简单的表达式. 为了利用变分资料同化中模式状态量和伴随状态量之间的对偶性质, 本文提出在对偶数空间中求解资料同化问题的新方法. 引入对偶数后, 因为实部和对偶部分别对应状态量和伴随量 (或梯度值), 所以能将状态量和敏感度在时间上演化的数值计算结合在一起. 在对偶数空间中数值求解微分方程可以同时获得不同时刻上预报状态量关于未知参数或活跃变量的敏感度值; 在对偶数空间计算出目标泛函后能同时得到目标泛函及其梯度向量值. 下面首先介绍对偶数的定义和基本性质, 对偶数最早由 Clifford^[16] 提出, 其定义如下:

$$\hat{z} = z + \varepsilon z', \quad (1)$$

其中 z 和 z' 均为实数, 分别称为基本部分和对偶部分. 对偶标记 ε 不表示任何具体数值, 但具有性质 $\varepsilon \neq 0$ 和 $\varepsilon^n = 0$ ($n > 1$, 即 ε 对所有大于 1 的幂运算都为零)^[16-20]. 为了表示方便, (1) 式可写成二元对形式 $\hat{z} = \langle z, z' \rangle$. 两个对偶数相等的条件是实部与对偶部分别相等; 对偶数为 0 即实部与对偶部同时为 0. 对偶数的模定义为 $|\hat{z}| = z$, 可以为正数或负数; 对偶数 $\hat{z}$ 的共轭数为 $\hat{z}^* = z - \varepsilon z'$, 因此有 $\hat{z}\hat{z}^* = z^2$. 如果将 z 和 z' 扩展为向量, 则可以将对偶数 $\hat{z}$ 扩展为对偶向量. 在类似变分资料同化问题的特殊情形中考虑到目标泛函 $J(\mathbf{x}_0)$ 为标量和 $\mathbf{x}_0$ 是 n 维需要优化确定的向量, 则实际使用的对偶数写成如下形式: $\hat{z} = z + \varepsilon_1 z'_1 + \varepsilon_2 z'_2 + \cdots + \varepsilon_n z'_n = z + \varepsilon \cdot \mathbf{z}'$, 对偶标记向量 $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n)$ 中的每个分量 ε_i 具有与对偶标记 ε 相同的性质, 且 $\varepsilon_i \varepsilon_j = 0$. 虽然对偶数概念及其理论的提出已超过一个世纪, 但直到 20 世纪 80 年代, 对偶数才被应用于机器人运动学和惯性导航等运动学和动力学问题中^[17,18]. 近年来, 对偶数理论一个非常具有吸引力的应用是为高效和精确地计算导数信息开辟了新途径^[19,20].

2.2 对偶数运算法则

利用对偶数的性质, 可以将实数域中的代数运

算法则扩展到对偶数空间. 如果已知两个对偶数: $\hat{a} = a + \varepsilon a'$, $\hat{b} = b + \varepsilon b'$, 则它们的和、差运算为^[20]

$$(a + a'\varepsilon) \pm (b + b'\varepsilon) = (a \pm b) + (a' \pm b')\varepsilon. \quad (2)$$

然后考虑两个任意对偶数的乘法, 显然有

$$\begin{aligned} (a + a'\varepsilon) \times (b + b'\varepsilon) \\ = ab + ab'\varepsilon + ba'\varepsilon + a'b'\varepsilon^2 \\ = ab + (ab' + ba')\varepsilon. \end{aligned} \quad (3)$$

在(3)式中 $a'b'\varepsilon^2$ 项被略去不是因为 a' 和 b' 太小, 而是因为 ε 的二次幂运算为零^[20], 所以(3)式表示的对偶数乘法运算是严格相等的, 不存在截断误差. 同理, 下面所有对偶数运算法则都是严格正确的, 不存在任何近似和假设. 接着考虑对偶数的多项式运算, (4)式给出了实数域空间中的多项式表达式:

$$P(z) = p_0 + p_1z + p_2z^2 + \cdots + p_nz^n, \quad (4)$$

其中 $p_0, p_1, p_2, \cdots, p_n$ 是多项式实系数. 将对偶数 $\hat{z} = \langle z, z' \rangle = z + z'\varepsilon$ 代替实数 z 代入(4)式后, 同时利用对偶数加法和乘法法则(2)和(3)式, 则容易证明

$$\begin{aligned} P(\hat{z}) &= p_0 + p_1(z + z'\varepsilon) + p_2(z + z'\varepsilon)^2 + \cdots \\ &\quad + p_n(z + z'\varepsilon)^n \\ &= p_0 + p_1z + p_2z^2 + \cdots + p_nz^n + p_1z'\varepsilon \\ &\quad + 2p_2zz'\varepsilon + \cdots + np_nz^{n-1}z'\varepsilon \\ &= P(z) + P^{(1)}(z)z'\varepsilon \\ &= \langle P(z), P^{(1)}(z)z' \rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

其中 $P^{(1)}$ 表示实数多项式 $P(z)$ 关于实变量 z 的一阶导数; 而 z' 是种子数, 可以取任意值. 显然如果取 $z' = 1$, 则对偶部分就是多项式函数 $P(z)$ 一阶导数 $dP(z)/dz$ 的精确值. 利用多项式运算法则(5)式可以很容易地将对偶数运算扩展到通常的解析函数和复合函数计算上, 从而得到其他基本代数运算和常用标准函数在对偶数空间中的新运算法则, 列举如下^[20]:

$$\begin{aligned} \hat{a}/\hat{b} &= \langle a/b, (a'b - ab')/b^2 \rangle, \quad (b \neq 0), \\ \sin(\hat{z}) &= \langle \sin(z), z' \cos(z) \rangle, \\ \cos(\hat{z}) &= \langle \cos(z), -z' \sin(z) \rangle, \\ \sinh(\hat{z}) &= \langle \sinh(z), z' \cosh(z) \rangle, \\ \cosh(\hat{z}) &= \langle \cosh(z), z' \sinh(z) \rangle, \\ \exp(\hat{z}) &= \langle \exp(z), z' \exp(z) \rangle, \end{aligned}$$

$$\log(\hat{z}) = \langle \log(z), z'/z \rangle, \quad (z > 0),$$

$$\hat{z}^k = \langle z^k, kz^{k-1}z' \rangle, \quad (z \neq 0),$$

$$|\hat{z}| = \langle |z|, z' \text{sign} z \rangle, \quad (z \neq 0).$$

对于其他基本函数, 可以给出类似的推导出对偶数运算关系式, 并且对于一般的双变量基本函数 f 有

$$f(\hat{x}, \hat{y}) = \langle f(x, y), f_x(x, y)x' + f_y(x, y)y' \rangle, \quad (6)$$

(6)式中 f_x 和 f_y 是函数 f 分别关于自变量 x 和 y 的偏导数. (6)式可以进一步扩展到自变量为对偶数向量 $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \varepsilon \mathbf{x}'$ 的情形:

$$f(\hat{\mathbf{x}}) = \langle f(\mathbf{x}), \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}' \rangle, \quad (7)$$

(7)式中 $\mathbf{x}, \mathbf{x}' \in \mathbb{R}^n$ 都是 n 维矢量. 当上述对偶数基本算术运算和函数作用于混合自变量时, 例如对偶数 $\langle x, x' \rangle$ 和实数 c , 首先需要将实数 c 改写成对偶数 $\langle c, 0 \rangle$, 然后根据上面的对偶数运算法则进行计算. 任意函数 $f(x)$ 在 x_0 点上的导数可以通过在对偶数空间 $\langle x_0, 1 \rangle$ 处直接计算 $f(\langle x_0, 1 \rangle)$ 而获得, 结果是 $\langle f(x_0), f'(x_0) \rangle$; 同理自变量为矢量 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ 的函数 $f(\mathbf{x})$ 在 $\mathbf{x}_0$ 点处方向 $\mathbf{x}' \in \mathbb{R}^n$ 上的方向导数可以通过上面的对偶数运算法则直接计算函数 $f(\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle)$ 的值而获得, 结果是 $\langle f(\mathbf{x}), \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{x}' \rangle$. 任何一个由计算机程序定义的复杂函数都可以被当作一个由基本代数运算和标准函数构成的有限序列, 因此基于对偶数运算法则在原理上可以计算出任意复杂函数在对偶数空间的值, 即任意函数本身在实数空间的数值和函数关于自变量的梯度值.

综上所述, 基于对偶数理论, 在实数空间中的复杂导数计算问题可以转化为对偶数空间中的函数直接计算过程. 在实数空间中利用有限差分方法计算函数对多元自变量的导数值时, 需要对函数中每个输入量分别进行扰动, 然后利用扰动和未扰动函数值代入差分公式计算导数值. 如果扰动步长太大时, 则存在较大的截断误差; 而扰动步长太小时, 又会引入减消误差. 为了平衡两种误差, 需要选择最优扰动步长. 而在对偶数空间中, 在直接计算函数值的同时能够获得函数关于自变量的导数值, 因为避免了差分运算, 所以不会引入截断误差和减消误差, 在计算机上实现时可以达到机器精度.

2.3 资料同化新方法

在基于对偶数理论的求导法中, 对任意以实变量 u 为自变量的目标泛函 $J(u)$, 首先以 u 为实部和以 $\varepsilon u'(\varepsilon$ 为对偶标记, 取 $u' = 1)$ 为对偶部分构造对

偶变量 $\hat{u} = u + \varepsilon u'$; 其次将所构造的对偶变量代入目标泛函中, 从而将实变函数 $J(u)$ 转化为以偶数 $\hat{u}$ 为自变量的对偶函数, 为避免混淆用 $\hat{J}(\hat{u})$ 表示; 然后将对偶函数 $\hat{J}(\hat{u})$ 按 Taylor 级数展开:

$$\begin{aligned}\hat{J}(\hat{u}) &= J(u) + \varepsilon u' \frac{J'(u)}{1!} + \varepsilon^2 u'^2 \frac{J''(u)}{2!} + \cdots \\ &\quad + (\varepsilon u')^n \frac{J^n(u)}{n!} + \cdots \\ &= \langle J(u), \nabla_u J \rangle.\end{aligned}\quad (8)$$

因为 $\varepsilon^n = 0$ ($n > 1$), 所以 (8) 式右端二阶以上的高阶项可略去, 从而等式两边的实部及对偶部严格对应相等, 可得

$$J(u) = \text{Re}[\hat{J}(\hat{u})], \quad \nabla_u J = \text{Du}[\hat{J}(\hat{u})]. \quad (9)$$

在 (9) 式中, $\text{Re}[\]$ 和 $\text{Du}[\]$ 分别表示取对偶函数的实部与对偶部. 由 (9) 式可知, 若要计算目标泛函关于控制变量的一阶导数, 只需要把原来实数目标泛函中的自变量替换为相应的对偶数变量, 然后在偶数空间中求出对偶数形式的泛函值后, 取其对偶部即可得到目标泛函关于该自变量的一阶导数. 如果不存在其他计算误差源, 则基于对偶数理论的目标泛函一阶导数计算精度不受计算机精度的影响, 因此可以认为 (9) 式给出的函数导数是精确数值解 [19,20].

对于二维控制向量 $\hat{u} = (\hat{u}_1, \hat{u}_2) = (\langle u_1, u'_1 \rangle, \langle u_2, u'_2 \rangle)$, 将对偶函数 $\hat{J}(\hat{u})$ 按 Taylor 级数展开:

$$\begin{aligned}\hat{J}(\hat{u}) &= J(u) + \varepsilon u'_1 \frac{\nabla_{u_1} J(u)}{1!} + \varepsilon u'_2 \frac{\nabla_{u_2} J(u)}{1!} \\ &\quad + \frac{\varepsilon^2}{2!} \left(u'^2_1 \frac{\partial^2 J}{\partial u_1^2} + u'_1 u'_2 \frac{\partial^2 J}{\partial u_1 \partial u_2} + u'^2_2 \frac{\partial^2 J}{\partial u_2^2} \right) \\ &\quad + \cdots.\end{aligned}\quad (10)$$

同理利用 ε 的性质可略去 (10) 式右端二阶以上的导数项, 同时取种子数 $u'_1 = u'_2 = 1$, 从而等式两边的实部及对偶部严格对应相等, 可得

$$J(u) = \text{Re}[\hat{J}(\hat{u})], \quad \nabla_u J = \text{Du}[\hat{J}(\hat{u})]. \quad (11)$$

对于 n 维控制向量 $\hat{u} = (\hat{u}_1, \hat{u}_2, \cdots, \hat{u}_n)$, 可以得到与 (11) 式类似的表达式.

对偶数微分法可以解决一般解析方法无法求解的强非线性和隐函数导数计算问题, 且只需要对偶数空间的正向运算即可完成, 对于高维情形计算代价远小于常规差分方法. 总之, 新方法通过在对偶数空间中计算目标泛函值, 实现了同时求目标泛函及其关于未知变量导数值的目标. 相对于直接差

分方法, 基于对偶数理论的自动微分方法不受截断误差和减消误差的影响; 相对于伴随方法, 新方法不需要开发原预报模式的切线性和伴随模式等一阶微分模式, 不需要对伴随方程进行逆向积分. 由此可见, 该方法避免了专门的求导运算, 可以方便和自然地实现资料同化中目标泛函梯度的计算. 在获得未知初始状态向量的泛函梯度之后, 选择合适的下降算法 (如, 拟牛顿算法和共轭梯度算法) 根据下式对各个未知参数进行迭代优化:

$$\begin{aligned}u^{i+1}_j &= u^i_j - \nabla_{u_j} J|_{u^i} \cdot \rho^{i+1}_j, \\ j &= 1, 2, \cdots, n,\end{aligned}\quad (12)$$

最终可以确定非线性动力预报模式的初始状态向量. 当 $i = 0$ 时 u^i 表示未知初始状态向量的初猜值; ρ^{i+1}_j ($j = 1, 2, \cdots, n$) 表示第 i 次迭代步长, 步长大小由下降算法确定. 基于对偶数理论的资料同化方法具体流程如图 1 所示, 详细说明如下.

第一步 采用一定的差分格式 (例如: 四阶龙格-库塔算法) 实现求解微分方程的数值程序, 然后利用对偶数空间中的代数运算和标准函数计算法则对有关程序 (包括预报模式、观测算子和目标泛函等的计算程序) 进行修改, 使其适合于对偶数空间的数值运算.

第二步 设定初始状态向量的初猜值 $\hat{u}^0$.

第三步 利用新估计值, 通过对偶数理论自动微分方法计算目标泛函值和梯度向量, 具体包括下面的步骤:

1) 针对初始状态向量的每个分量, 取种子数为 1, 依次将实数值改写成对偶数, 最终构造出对偶数形式的初始状态向量

$$\hat{u}^i = (\langle u^i_1, e_1 \rangle, \langle u^i_2, e_2 \rangle, \cdots, \langle u^i_n, e_n \rangle),$$

e_j 表示第 j 个分量为 1 的 n 维单位向量;

2) 将对偶数向量 $\hat{u}^i$ 作为非线性动力预报模式的初始条件, 并利用第一步中实现的程序在对偶数空间进行正向积分, 获得对偶数形式的系统状态演化轨迹 $\hat{x}(t)$, 其中 $\hat{x}(t)$ 的实部和实部部分分别表示不同时间步上的状态向量值 $x(t)$ 及 $x(t)$ 关于初始状态向量 u 的导数或 Jacobian 矩阵;

3) 利用 $\hat{x}(t)$ 和观测数据 $y^{\text{obs}}(t)$ 在对偶数空间计算目标泛函值, 然后根据 (11) 式分别计算目标泛函值及其关于初始条件的梯度向量.

第四步 利用目标泛函梯度信息, 结合典型的最优化下降算法, 求出步长 ρ^{i+1}_j , 根据 (12) 式对初始状态向量中各个分量进行迭代, 求出新估计值

u^{i+1} . 如果满足程序终止条件(如, 达到所要求的收敛精度或最大迭代次数), 则终止程序, 同时获得初始状态向量估计值; 若不满足, 利用新的初始状态向量 u^{i+1} 值从第三步开始新一轮的迭代循环.

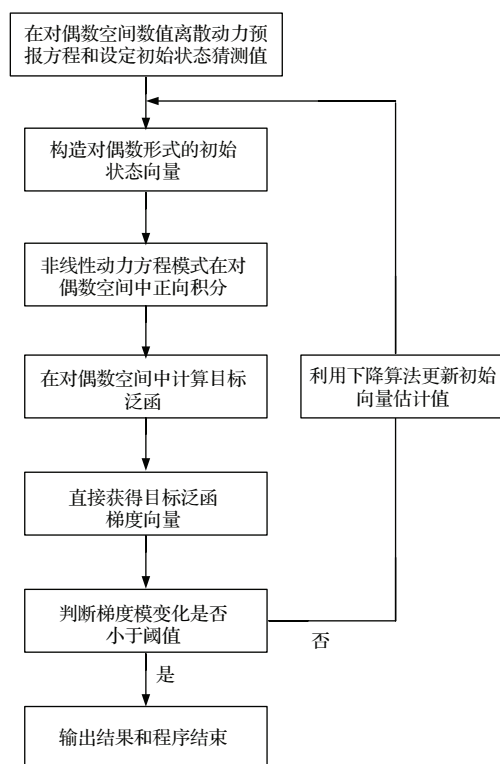


图1 基于对偶数理论的资料同化流程图

Fig. 1. The flow diagram of data assimilation using dual number theory.

3 数值实验结果及分析

3.1 基于对偶数方法的敏感度计算

为了说明基于对偶数理论方法能准确计算导数值的优点, 首先以一个海-气耦合振子模型^[21]不同时刻状态量对初始值导数或敏感度的计算为例. 该模型由非线性微分方程描述如下:

$$\begin{aligned}\dot{T} &= CT + Dh - \varepsilon T^3, \\ \dot{h} &= -ET - R_h h, \\ T|_{t=0} &= T_0, h|_{t=0} = h_0.\end{aligned}\quad (13)$$

(13) 式描述了赤道东太平洋的海表温度(SST)距平 T 和海洋中的温跃层厚度距平 h 之间的相互作用机理, C, D, E, R_h 和 ε 表示正的模式参数, 有关它们的详细定义和物理意义见相关文献. $\dot{T}$ 和 $\dot{h}$ 表示状态量随时间的变化率, T_0 和 h_0 表示在初始时刻 $t = 0$ 的状态量, 末端时间设置为 $T = 5$. 为了方便验证对偶数方法计算敏感度的精度, 考虑(13)式

的一种特殊情形, 首先令 $D = 0$, 则可以得到非线性方程^[21]

$$\dot{T} = CT - \varepsilon T^3, \quad (14)$$

当 $0 < \varepsilon \ll 1$ 时, 非线性方程(14)存在关于 SST 的精确解^[21].

为了计算时间段 $t \in (0, T]$ 内非线性动力系统(14)式状态量 $T(t)$ 相对于初始状态 T_0 的敏感度, 即 $s(t) = dT(t)/dT_0$, 现在考虑两种方法: 一种是有限差分方法, 另外一种是基于对偶数理论的敏感度计算方法. 数值模拟试验中初始值和有关物理参数设置为 $T_0 = 0.5$, $C = 0.5$ 和 $\varepsilon = 0.01$, 采用四阶龙格-库塔算法数值求解常微分方程(14)式, 积分步长设置为 $\tau = 0.01$, 积分步数为 500. 有限差分方法计算敏感度的过程是分别以初值 T_0 和扰动初值 $T_0 + h$ 积分求解(14)式得到数值解 T_i 和 T'_i , $i = 1, 2, 3, \dots, N$, 然后计算不同时刻的敏感度值 $s_i = (T'_i - T_i)/h$. 基于对偶数理论的敏感度计算过程是利用对偶数运算法则修改常微分方程(14)式的四阶龙格-库塔算法程序, 然后以对偶数 $\langle T_0, 1 \rangle$ 为初值在对偶数空间中积分到末端时间 T , 同时获得不同时刻的温度值及其对初值的敏感度值 s_i^d , $i = 1, 2, 3, \dots, N$. 为了验证两种方法的准确性, 先利用变分迭代方法(VIM)^[22-24]求得(14)式温度状态量及其敏感度解析解的表达式如下:

$$\begin{aligned}T(t) &= [b + (1/T_0^2 - b) \exp(-2Ct)]^{-1/2}, \\ s(t) &= \frac{\exp(-2Ct)[b + (1/T_0^2 - b) \exp(-2Ct)]^{-3/2}}{T_0^3},\end{aligned}\quad (15)$$

其中 $b = \varepsilon/C$. 首先利用初值 T_0 和不同扰动量 $h = 0.05, 0.10$ 和 0.20 形成的扰动初值积分非线性微分方程(14)式, 然后利用差分方法求得三组敏感度信息, 分别如图2中点虚线、实线和虚线所示. 图2中新方法值和解析值分别是利用基于对偶数理论方法和解析表达式(15)式计算的敏感度值. 从图2中易知, 基于对偶数理论的方法能够非常精确地计算出(14)式状态 T 敏感度随时间的变化, 与解析值曲线几乎完全重合. 差分方法计算的敏感度值在积分的前段时间中与解析敏感度值具有一致性, 但随着初始扰动值的增大, 积分后段时间的敏感度越来越偏离敏感度真实值. 原因是差分方法会引入截断误差, 初始扰动量 h 越大, 则影响敏感度值的截断误差也就越大. 另外, 为了计算一组敏感度信息, 差分方法需要分别以不同初值对非线性微分

程(14)式进行两次数值积分;而对偶数方法只需要在对偶数空间对(14)式求解一次,就能同时计算出不同时刻的状态量和敏感度值.

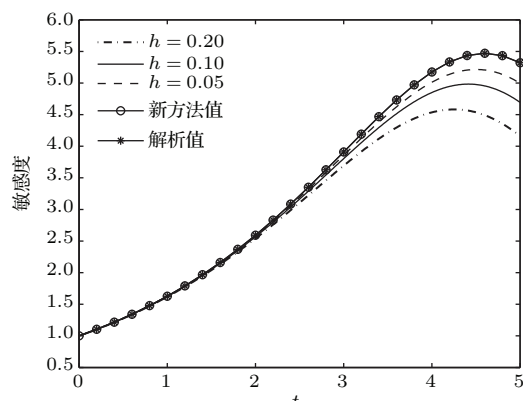


图2 利用不同方法计算非线性微分方程(14)式中状态量敏感度值 $s(t)$

Fig. 2. The sensitivity of state variable for nonlinear ordinary differential equation (14) calculated by different methods.

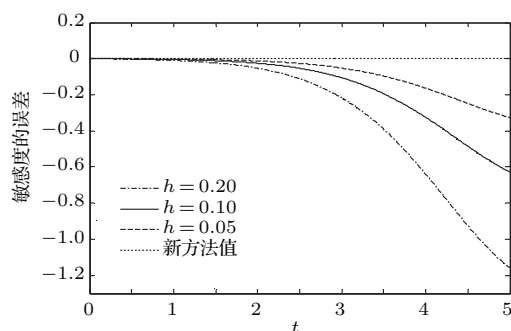


图3 利用不同方法计算的非线性微分方程(14)式敏感度误差

Fig. 3. The error of sensitivity for state variable of nonlinear ordinary differential equation (14) calculated by different methods.

为了进一步说明基于对偶数理论新方法的优越性,分别求差分方法、对偶数新方法计算的敏感度值与解析敏感度值的差值,并分别在图3中显示.图3的点虚线表示扰动量取 $h = 0.20$ 时的敏感度误差值,它的误差值最大,而且随时间增长最快;实线和虚线分别表示扰动量取 $h = 0.10$ 和 0.05 时的敏感度误差值,对比可知:随着初始扰动量的减小,由差分方法计算的敏感度误差值具有随时间延长变小的趋势.图3中点线表示的是基于对偶数理论新方法所计算的敏感度误差值,从图中可知误差值随时间几乎无增大的趋势,在所研究的时间段内误差曲线和零线是重叠的,实际误差值的变化区间为 $[-5.8356 \times 10^{-7}, 5.2008 \times 10^{-7}]$,因此说明新方法计算结果远远小于差分方法的敏感度误差值;需

要说明的是对偶数新方法所计算敏感度的精度低于计算机硬件精度,原因是在数值求解非线性方程(14)时引入了离散误差.

3.2 Lorenz 混沌系统资料同化

为了说明基于对偶数理论的新资料同化方法的有效性,接下来以典型的Lorenz(1963)混沌系统[25]为例进行资料同化试验. Lorenz系统由常微分方程组表示如下:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \sigma(y - x), \\ \dot{y} &= \gamma x - xz - y, \\ \dot{z} &= xy - bz, (x, y, z)|_{t=0} = (x_0, y_0, z_0).\end{aligned}\quad (16)$$

(16)式各个状态量和参数的物理意义见文献[25], Lorenz(1963)混沌系统可以视作是大气运动控制方程的简化形式,能体现大气运动的某些主要特征,如有限的预报性. 定义状态向量 $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$, 资料同化的目标是在获得离散分布的观测数据 $y_i^{\text{obs}} = (x_i^{\text{obs}}, y_i^{\text{obs}}, z_i^{\text{obs}})^T$, $i = 1, 2, \dots, N$ 的情况下,估计未知初始状态 $\mathbf{u} = (x_0, y_0, z_0)^T$.

数值仿真试验中各个物理参数的真值设置如下: $\sigma = 10$, $\gamma = 28$ 和 $b = 8/3$. 首先采用四阶龙格-库塔算法实现Lorenz系统方程(16)的数值求解程序;其次实现计算目标泛函的数值程序;然后基于对偶数运算法则对程序进行修改. 观测数据采集过程如下:设定模式初始状态量 (x_0, y_0, z_0) 为 $(1.0, 2.0, 1.5)$ 、时间积分区间为 $[0, 3]$ 和积分步长 $\tau = 0.05$,并进行数值模式积分得到离散时间序列上的状态值,然后叠加高斯型观测噪声 $N(0, \sigma_o)$ 作为观测数据,噪声的均值和标准偏差分别取为0和 σ_o . 在不考虑背景场信息的情况下,离散形式的目标泛函表示如下:

$$\hat{J}(\hat{\mathbf{u}}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^{\text{obs}}\|^2, \quad (17)$$

式中 N 表示观测数量, $\|\cdot\|^2$ 表示欧几里德范数. 未知初始状态向量的初猜值设定为 $\mathbf{u}^0 = (3.0, 4.0, 5.0)$. 在利用基于对偶数理论的资料同化方法对Lorenz混沌系统未知初始状态向量进行迭代估计过程中,未知向量 $\mathbf{u}$ 的每次更新,首先都要构造对偶数向量 $\hat{\mathbf{u}}^i = (\langle u_1^i, \mathbf{e}_1 \rangle, \langle u_2^i, \mathbf{e}_2 \rangle, \langle u_3^i, \mathbf{e}_3 \rangle)$, $\mathbf{e}_j$ ($j = 1, 2, 3$)表示第 j 个分量为1的3维单位向量,并输入Lorenz对偶数模式程序进行正向($0 \rightarrow T$)积分;其次在对偶数空间中计算目标泛函 $\hat{J}(\hat{\mathbf{u}})$;然后分别取实部和对偶部作为目标泛函 J

和泛函梯度向量 $\nabla_u J$ 的数值; 最后采用共轭梯度算法对初始状态向量值进行更新. 为了验证新同化方法的有效性, 在数值实验中只引入少量观测数据以估计初始状态量, 即仅将 $4h$, $8h$ 和 $12h$ 三个时刻的状态量作为观测数据.

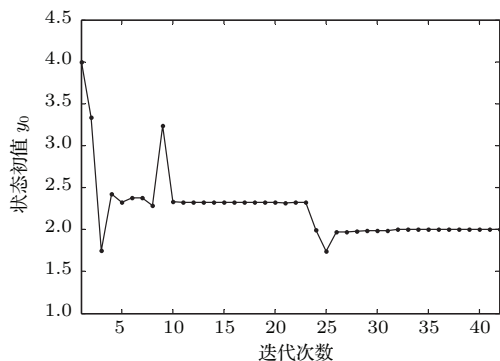


图4 初始状态 y_0 随迭代次数的变化

Fig. 4. The change of initial state y_0 with iteration number.

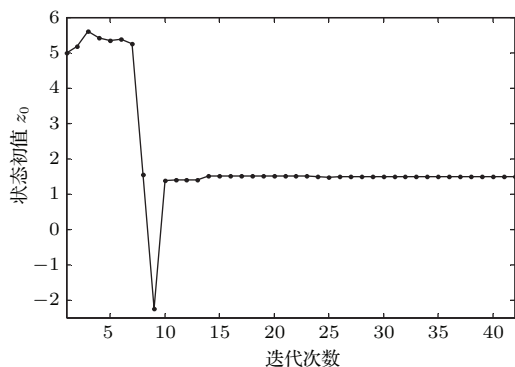


图5 初始状态 z_0 随迭代次数的变化

Fig. 5. The change of initial state z_0 with iteration number.

图4至图7显示了基于对偶数理论的资料同化方法对Lorenz系统在不存在观测噪声(即 $\sigma_o = 0$) 时的资料同化数值试验结果. 图4和图5分别表示的是未知初始状态量 y_0 和 z_0 在迭代估计过程中的数值变化, 从图中可知迭代值逐渐收敛到真值; x_0 也有类似结果, 为节省篇幅没有给出. 图6和图7分别表示的是目标泛函和泛函梯度模值的下降变化图. 从图中可以看到, 在经过41次迭代后目标泛函达到收敛, 对未知初始状态向量 u 四舍五入到小数点后第五位后得: $x_0 = 0.99999$, $y_0 = 2.00002$ 和 $z_0 = 1.50000$, 说明估计值已经非常接近真实值. 理论上当目标泛函关于控制变量的梯度模是0时, 未知初始状态向量取最优估计值, 但为了减小计算量, 本文采用了通常的收敛标准: 前后两次迭代的目标泛函梯度模变化小于预先指定的阈值: $\|\nabla_u J\| - \|\nabla_u J\| < 10^{-6}$, 此时的计

算误差小于机器误差. 分析图中所示的试验结果可得如下结论: 在不引入背景场和仅仅利用较少观测信息的情况下, 基于对偶数理论的资料同化新方法能准确地估计出Lorenz 63混沌系统方程的初始状态, 估计精度达到了 $O(10^{-5})$.

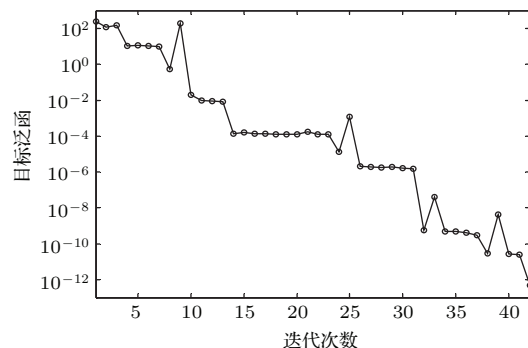


图6 Lorenz系统目标泛函 $J(u)$ 的变化

Fig. 6. The change of cost function $J(u)$ for Lorenz chaotic system with iteration number.

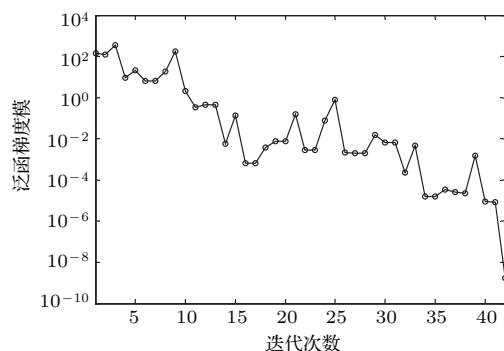


图7 Lorenz系统泛函梯度模 $\|\nabla_u J\|$ 的变化

Fig. 7. The change of gradient norm $\|\nabla_u J\|$ for Lorenz chaotic system.

新同化方法的优势是无需编写变分资料同化方法中Lorenz系统^[25]方程(24)的切线性/伴随模式程序, 而是基于对偶数理论就能方便和准确地计算出泛函梯度, 从而使目标泛函快速下降. 表1给出了在不同观测噪声水平时新同化方法对Lorenz混沌系统初始状态的估计值、最终的目标泛函值和迭代次数. 从表中可知, 当不存在观测误差时, 未知初始状态的估计精度最高, 各个初始状态量可以精确到小数点后第5位, 表明了基于对偶数新资料同化方法估计非线性物理系统未知初始状态的有效性. 另外, 随着观测误差增加, 资料同化结果的精度下降, 但迭代估计结果仍然收敛到真实值附近; 即使当观测误差的标准偏差为 $\sigma_o = 0.2$ 时, 资料同化结果仍然较接近真实值, 可以精确到小数点后1位, 说明基于对偶数的新资料同化方法具有一定的抗噪声性能.

表1 不同观测噪声水平情况下 Lorenz 混沌系统的资料同化结果

Table 1. The results of data assimilation for Lorenz chaotic system under different levels of observation noise.

	x_0	y_0	z_0	$J(u)$	迭代次数
真值	1.0	2.0	1.5	—	—
$\sigma_o = 0.0$	0.99999	2.00002	1.50000	4.954×10^{-13}	41
$\sigma_o = 0.1$	0.99858	2.00852	1.49899	6.566×10^{-8}	45
$\sigma_o = 0.2$	1.08649	2.09752	1.48756	8.630×10^{-7}	40

3.3 “On-off” 系统资料同化

业务数值天气预报模式中通常包含有物理过程, 如湍流混合、湿对流、大尺度凝结、垂直扩散和辐射等. 由于物理过程的复杂性, 需要用参数化方案描述其对模式预报的影响, 而在参数化过程中会在临界值处导致模式方程中的某些项关于时间或模式变量不连续或不可微, 此现象一般称为“开关”(on-off) 问题^[26–28]. 目前全球或区域变分资料同化系统中都需要针对物理过程参数化方案进行大量简化或者特殊处理后, 才能实现相应的切线性/伴随模式程序模块, 整个切线性/伴随模式的精确度受限于物理过程参数化程序切线性/伴随程序模块的准确度, 这也是受云/雨污染卫星和雷达观测资料不能有效同化的难点之一. 因此研究包含“开关”的物理系统的新资料同化方法不仅具有理论意义, 而且有实际应用价值^[26–28]. 本部分中以一个比湿发展方程^[28]为例, 进一步说明利用基于对偶数理论的资料同化方法克服“开关”问题和估计非线性物理系统未知初始条件的有效性. 比湿发展方程可用常微分方程组表示如下:

$$\begin{aligned} \dot{q} &= B - At + H_+(q - q_c)Gq, \\ q|_{t=0} &= q_0, \end{aligned} \quad (18)$$

方程(18)式描述了实际预报模式中单个格点上比湿随时间的发展变化, 其中 $A > 0$, $B > 0$, $G < 0$, 且均为常数; H_+ 为 Heaviside 函数, q_c 为饱和阈值, 它为一个取定的常数^[28]. 为了保证同化窗口可以产生“on-off”振荡发生, 进一步假设 $B + Gq_c < 0$. 离散形式的目标泛函定义为

$$J(q_0) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (q_i - q_i^{\text{obs}})^2,$$

其中 q_i 和 q_i^{obs} 分别表示在同化时段 $[0, T]$ 内观测位置 i 处方程(18)的数值解和观测值. 目标是在获得时间上离散分布的观测量 q_i^{obs} , $i = 1, 2, 3, \dots, N$

的情况下, 利用基于对偶数理论的资料同化方法准确估计比湿的初始状态量 q_0 .

仿真试验中采用前向差分格式数值求解常微分方程(18)式. 模式中的参数分别取为 $A = 3.8$, $B = 1.7$, $G = -4.3$, $q_c = 1.7$. 同化窗口取为 $[0, 1]$, 时间步长 $\tau = 0.01$. 观测数据生成过程采用与 3.2 中 Lorenz 系统资料同化相同的方法. 在数值试验中, 模式初始状态量 q_0 取为 1.5. 在获得单格点比湿发展方程的数值模式、目标泛函及其梯度表达式后, 利用图 1 中所示的算法流程可以对 q_0 进行最优估计. 基于对偶数理论的资料同化方法对比湿初始状态第 i 次迭代估计过程中, 首先都要构造对偶数 $\hat{u}^i = u^i + \varepsilon$, 并输入单格点比湿发展方程的对偶数模式程序进行正向 ($0 \rightarrow T$) 积分; 其次在对偶数空间中计算目标泛函 $\hat{J}(\hat{u})$; 然后分别取实部和对偶部作为目标泛函 J 和泛函梯度向量 $\nabla_u J$ 的数值; 最后采用共轭梯度算法对初始状态向量值进行更新. 为了验证新同化方法应用于非连续物理系统的有效性, 在同化数值实验过程中选择 5 个时刻的状态量作为观测数据(如图 9 所示), 同时不考虑引入先验背景场信息.

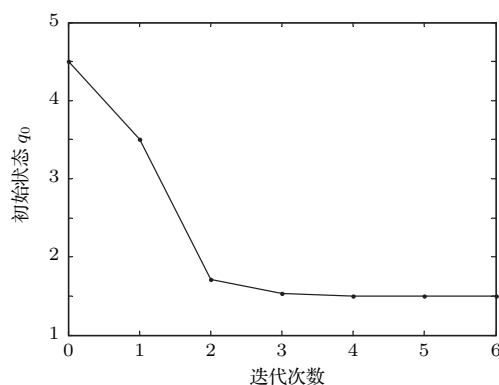

 图8 q_0 随迭代次数的变化

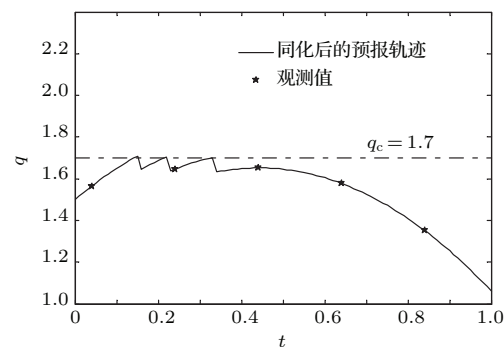
 Fig. 8. The change of specific humidity q_0 with iteration number.


图9 同化后的预报轨迹与观测的一致性

Fig. 9. Comparison between assimilated forecast trajectory and observations.

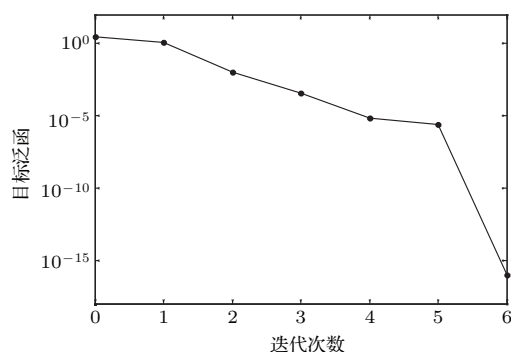

 图 10 “on-off” 系统目标泛函 J 收敛曲线

Fig. 10. The change of cost function $J(u)$ for the on-off system with iteration number.

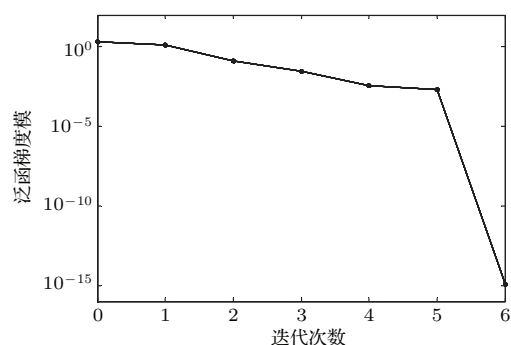

 图 11 “on-off” 系统泛函梯度模 $\|\nabla_u J\|$ 的变化

Fig. 11. The change of gradient norm $\|\nabla_u J\|$ for the on-off system.

表 2 不同观测噪声水平情况下单格点比湿发展方程的资料同化结果

Table 2. The results of data assimilation for specific humidity evolving equation with physical “on-off” process under different levels of observation noise.

	q_0	J	迭代次数
真值	1.5	—	—
$\sigma_o = 0.0$	1.50000	2.336×10^{-18}	6
$\sigma_o = 0.1$	1.49973	2.310×10^{-6}	7
$\sigma_o = 0.2$	1.49864	4.511×10^{-3}	6

图 8 和图 9 分别给出了无观测噪声时未知量 q_0 的迭代估计序列值和同化后的预报轨迹与观测数据之间的一致性程度; 图 10 和图 11 分别表示的是目标泛函值 $J(u)$ 和泛函梯度模 $\|\nabla_u J\|$ 的下降图. 表 2 给出了在不同观测噪声水平情况下新同化方法对包含开关的单格点比湿发展方程初始条件的估计值、最终的目标泛函值和迭代次数. 从图中可以看到, 在经历 6 次迭代后目标泛函达到收敛, 同时获得未知初始状态向量 q_0 的估计值, 具体如

表 2 所示. 分析图中所示的试验结果可得如下结论: 采用基于对偶数理论的资料同化方法估计单格点比湿发展方程的初始条件具有较高的准确性, 另外新方法的优势是由对偶数微分方法能够直接和准确的计算出不可微物理系统资料同化中的目标泛函梯度, 因此使目标泛函快速下降. 从表 2 中可以看出, 在不存在观测误差时, 比湿初始状态量的估计精度最高, 估计结果可以精确到小数点后第五位, 基本上可以当作真值使用; 随着误差增加, 同化结果的估计精度下降, 但迭代估计值仍然收敛到真值附近, 进一步验证了新资料同化方法的有效性; 同时说明新方法具有较好的抗噪声性能.

3.4 一维抛物方程的参数同化

本部分中以抛物型偏微分方程中的一维热传导方程为例, 进一步说明对偶数方法在偏微分方程参数同化中的有效性. 所研究的一维热传导方程为^[29]

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= \sigma \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}, \quad (0 < x < L, 0 < t < T), \\ U|_{x=0} &= 1, \quad U|_{x=L} = 1, \\ U|_{t=0} &= 2, \quad (2L/5 \leq x \leq 3L/5), \\ U|_{t=0} &= 1, \quad (x < 2L/5, x > 3L/5), \end{aligned} \quad (19)$$

(19) 式中 U 表示温度状态量, L 和 T 分别表示热传导的空间和时间范围, 第二行方程给出的是边界条件, 第三和第四个方程所给出的初始条件是一个方波形状的高温分布. (19) 式描述的物理现象是中间位置的高温状态向两端低温区传热, 直到达到等温状态. 从某些位置的温度测量数据确定未知的热传导系数 σ 值是典型的反问题^[29]. 反问题的求解都要以正问题的解决为前提, 因此引入标准的显式差分格式对热传导方程 (19) 式进行离散有

$$\begin{aligned} U_j^{k+1} &= U_j^k + \sigma \Delta t (U_{j-1}^k - 2U_j^k + U_{j+1}^k) / \Delta x^2, \\ U_0^{k+1} &= 1, \quad U_J^{k+1} = 1, \end{aligned}$$

其中 x 方向的空间指标 $j = 1, 2, \dots, J-1$, 时间指标 $k = 0, 1, \dots, N-1$, 其中模式变量 U_j^k 近似表示离散点上的温度状态量 $U(k\Delta t, j\Delta x)$, 且有 $\Delta t = (T/N)$ 和 $\Delta x = (L/J)$. 离散形式的目标泛函定义为

$$J(\sigma) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{J-1} (U_j^k - U_j^{\text{kobs}})^2,$$

其中 U_j^k 和 U_j^{kobs} 分别表示在时间 $k\Delta t$ 和空间位置 $j\Delta x$ 处方程 (19) 的数值解和观测值. 目标是在获得

一定数量离散分布观测数据 $U_j^{k\text{obs}}$ 的情况下, 利用基于对偶数理论的资料同化方法准确估计热传导系数 σ 的值.

数值试验中 (19) 式热传导系数取为 $\sigma = 0.01$, 时间区间取为 $[0, 3]$, 时间步长 $\tau = 0.1$, 空间边界 $L = 2$. 观测数据生成过程采用与 (3.2) 中 Lorenz 系统资料同化相同的方法. 在获得一维热传导方程的数值模式、目标泛函及其梯度表达式后, 利用图 1 中所示的算法流程可以对 σ 进行最优估计. 基于对偶数理论的资料同化方法对热扩散系数第 i 次迭代估计过程中, 首先都要构造对偶数 $\hat{u}^i = u^i + \varepsilon$, 并输入一维热传导方程的对偶数模式程序进行正向 ($0 \rightarrow T$) 积分; 其次在对偶数空间中计算目标泛函 $\hat{J}(\hat{u})$; 然后分别取实部和虚部作为目标泛函 J 和泛函梯度向量 $\nabla_u J$ 的数值; 最后采用共轭梯度算法对初始状态向量值进行更新. 为了验证新同化方法应用于偏微分方程的有效性, 在同化数值实验过程中选择第 10 个时间步时刻的部分温度状态量作为观测数据 (如图 13 所示), 且不考虑引入任何先验信息.

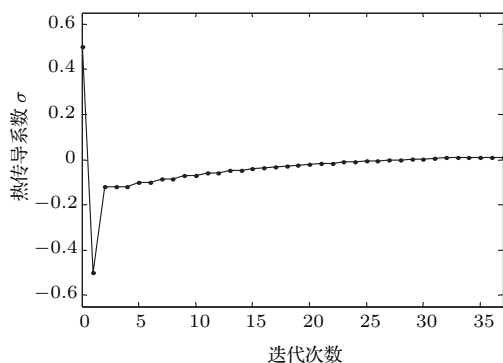


图 12 热传导系数随迭代次数的变化

Fig. 12. Change of coefficient σ with iteration number.

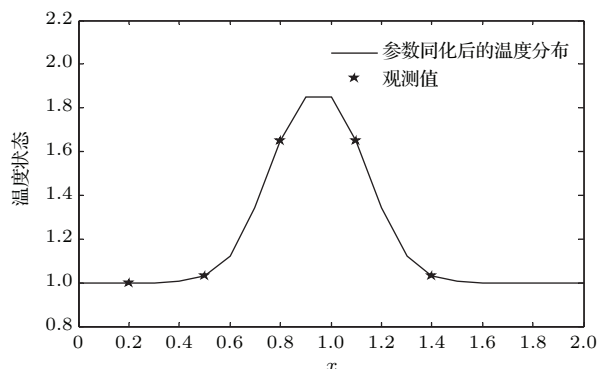


图 13 参数同化后的温度状态与观测的一致性

Fig. 13. Comparison between temperature states and observations after parameter identification.

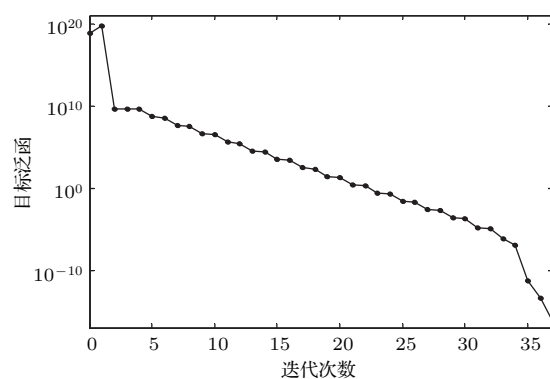


图 14 一维热传导方程目标泛函 J 收敛曲线

Fig. 14. Change of cost function $J(u)$ for the one-dimensional heat conduction equation.

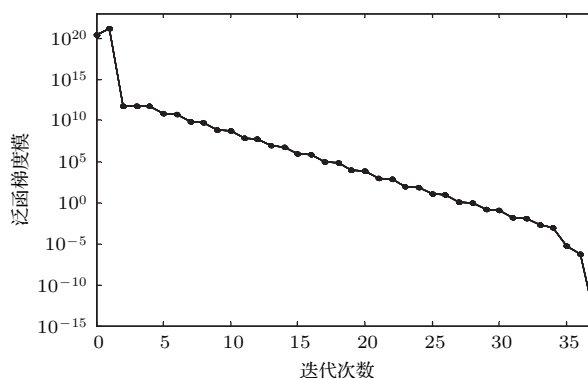


图 15 一维热传导方程泛函梯度模 $\|\nabla_u J\|$ 变化

Fig. 15. Change of gradient norm $\|\nabla_u J\|$ for the one-dimensional heat conduction equation.

表 3 不同观测噪声情况下二维热传导方程的参数同化结果
Table 3. The results of data assimilation for parameter in one-dimensional heat conduction equation under different levels of observation noise.

	σ	J	迭代次数
真值	0.01	—	—
$\sigma_o = 0.0$	9.99999×10^{-3}	3.657×10^{-17}	37
$\sigma_o = 0.1$	9.99824×10^{-3}	2.301×10^{-8}	35
$\sigma_o = 0.2$	1.02663×10^{-2}	7.261×10^{-5}	32

图 12 和图 13 分别给出了无观测噪声时未知量 σ 的迭代估计序列值和参数同化后的第 10 个时间步温度状态与观测数据之间的一致性程度, 从图中可知: 目标泛函收敛后所获得的热传导系数 σ 估计值非常接近真实值, 具体如表 3 所示. 图 14 和图 15 分别显示的是目标泛函 $J(u)$ 和泛函梯度模 $\|\nabla_u J\|$ 随迭代次数的下降图. 表 3 给出了在不同观测噪声水平情况下新方法对一维热传导方程 (19) 式中未知系数估计值、最终的目标泛函值和迭代次

数. 分析图 12 至图 15 和表 3 中所示的试验结果可得如下结论: 采用基于对偶数理论的新方法估计一维热传导方程的未知系数具有较高的准确性; 存在观测误差时虽然热传导系数的估计精度下降, 但最后的估计值仍然收敛到真实值附近, 进一步验证了新方法对抛物型偏微分方程的有效性.

4 结 论

针对变分资料同化中目标泛函梯度计算困难、复杂和精度不高的问题, 提出了一种基于对偶数自动微分的资料同化新方法. 利用对偶数理论把梯度分析过程转换为对偶数空间中目标泛函计算过程, 简单、高效和精确地获得梯度向量值. 主要优点是: 无需逆向积分和开发复杂的伴随模式, 只需通过一次正向运算就能计算出目标泛函及其梯度向量值. 结合经典的最优化方法后, 给出了非线性物理系统资料同化问题的新求解算法和计算流程; 最后针对典型混沌系统、包含“开关”的不可微物理模型和抛物型偏微分方程分别开展了资料同化数值实验, 结果表明: 新方法能非常有效地估计出非线性动力预报模式的初始条件或未知物理参数. 主要结论归纳如下: 1) 新方法对资料同化等以微分方程为约束条件的优化问题具有普适性; 2) 新方法计算目标泛函梯度简单易行, 在无其他误差源的情况下梯度计算精度能达到计算机硬件精度, 数值优化过程特别健壮, 所以适用于资料同化问题的求解; 3) 当存在观测噪声时, 估计的初始条件仍能收敛到真值附近, 而且迭代次数和计算代价不一定增加, 表明新方法具有较好的抗噪声性能. 利用新方法针对复杂和实际数值预报模式的资料同化效果和优势验证将在后续科研工作中进一步开展.

参考文献

- [1] Huang S X, Wu R S 2001 *Mathematical Physics Problems in Atmosphere Science* (Beijing: Meteorology Press) p460 (in Chinese) [黄思训、伍荣生 2001 大气科学中的数学物理问题 (北京: 气象出版社) 第 460 页]
- [2] Zou X L 2009 *Data Assimilation-Theory and Application* (Vol. 1) (Beijing: Meteorology Press) p43 (in Chinese) [邹晓蕾 2009 资料同化-理论与应用 (上册) (北京: 气象出版社) 第 43 页]
- [3] Evensen G 1994 *J. Geophys. Res.* **99** 10143
- [4] Talagrand O, Courtier P 1987 *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **113** 1311
- [5] Rabier F, Jarvinen H, Klinker E, Mahfouf J F 2000 *Q. J. R. Meteorol. Soc.* **126** 1148
- [6] Cao X Q, Huang S X, Du H D 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1984 (in Chinese) [曹小群, 黄思训, 杜华栋 2008 物理学报 **57** 1984]
- [7] Cao X Q, Song J Q, Zhang W M 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 170504 (in Chinese) [曹小群, 宋君强, 张卫民 2013 物理学报 **62** 170504]
- [8] Zhang W M, Cao X Q, Song J Q 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 249202 (in Chinese) [张卫民, 曹小群, 宋君强 2012 物理学报 **61** 249202]
- [9] Giering R 1998 *ACM Trans. On Math. Software* **24** 437
- [10] Cheng Q, Zhang H B, Wang B 2009 *Mathematica Numerica Sinica* **31** 15 (in Chinese) [程强, 张海斌, 王斌 2009 计算数学 **31** 15]
- [11] Lyness J N, Moler C B 1967 *SIAM Journal of Numerical Analysis* **4** 202
- [12] Martins J R R A 2002 *A Coupled-adjoint method for highfidelity aero-structural optimization* Ph. D. Dissertation. (Stanford: Stanford University)
- [13] Martins J R R A, Kroo I M, Alonso J J 2000 *Proceedings of the 38th Aerospace Sciences Meeting*, Reno, NV, January 2-5, AIAA Paper 2000-0689
- [14] Gao X W, Liu D D, Chen P C 2002 *Computational Mechanics* **28** 40
- [15] Guo L, Gao X W 2008 *journal of southeast university* (Natural Science Edition) **38** 141 (in Chinese) [郭力, 高效伟 2008 东南大学学报: 自然科学版 **38** 141]
- [16] Clifford W K 1871 *Proceedings of the London Mathematical Society* London, U.K., April 13-15, 1871 p381
- [17] Brodsky V, Shoham M 1999 *Mechanism and Machine Theory* **34** 693
- [18] WANG J Y, LIANG H Z, SUN Z W 2010 *Journal of Astronautics* **31** 1711 (in Chinese) [王剑颖, 梁海朝, 孙兆伟 2010 宇航学报 **31** 1711]
- [19] Spall R, Yu W 2013 *Journal of Fluids Engineering* **135** 014501
- [20] Wenbin Yu, Maxwell Blair 2013 *Computer Physics Communications* **184** 1446
- [21] Mo J Q, Lin W T, Zhu J 2006 *Adv. Math.* **35** 232
- [22] He J H 2008 *Int. J. Modern. Phys. B* **22** 3487
- [23] He J H, Lee E. W. M 2009 *Phys. Lett. A* **373** 1644
- [24] Wu G C 2012 *Chin. Phys. B* **21** 120504
- [25] Lorenz E N 1963 *J. Atmos. Sci.* **20** 130
- [26] Mu M, Zheng Q 2005 *Mon. Wea. Rev.* **133** 2711
- [27] Wang J F, Mu M, Zheng Q 2005 *Tellus* **57A** 736
- [28] Zheng Q, Sha J X, Fang C L 2012 *Sci. China Earth Sci.* **42** 458
- [29] Isakov V, Kindermann S 2000 *Inverse Problems* **16** 665

A new data assimilation method based on dual-number theory*

Cao Xiao-Qun^{1)2)3)†} Huang Qun-Bo¹⁾ Liu Bai-Nian¹⁾ Zhu Meng-Bin¹⁾ Yu Yi¹⁾

1) (School of Computer Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

2) (Academy of Ocean Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

3) (Science and Technology on Parallel and distributed Processing Laboratory, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

(Received 26 October 2014; revised manuscript received 30 January 2015)

Abstract

In gradient computations of the variational data assimilation (VDA) by the adjoint method, in order to overcome a lot of shortcomings such as low accuracy, difficult implementation, and great complexity, etc., a novel data assimilation method is proposed based on the dual-number theory. The important advantages are that the coding of adjoint models and reverse integrations are not necessary any more, and the values of cost functional and its corresponding gradient vectors can be attained simultaneously only by one forward computation in dual-number space. Furthermore, the accuracy of gradient can be close to the computer machine precision without other error sources. The paper is organised as follows. Firstly, the dual-number theory and algorithm rules are introduced. Then, the issues of gradient analysis and computation in VDA are transformed into the processes of calculating the cost functional numerically in dual-number space, and the gradient vectors can be obtained at the same time in an easy, efficient and accurate way. Secondly, the new algorithm for data assimilation in nonlinear physical systems is developed by combining accurate gradient information from the dual-number method with classical optimization algorithm. Thirdly, numerical experiments on sensitivity analysis for an ENSO nonlinear air-sea coupled oscillator are implemented, and the results are presented to demonstrate the important advantages of the dual-number method in the calculation of derivative information. Finally, numerical simulations for data assimilation are carried out respectively for the typical Lorenz 63 chaotic systems, the specific humidity evolving equation with physical “on-off” process at a single grid point, and a parabolic partial differential equation. Some conclusions can be drawn from the numerical experiments. The newly proposed method may be suited to many kinds of optimization problems with ordinary or partial differential equations as constraints, such as data assimilation, parameter estimation, inverse problems, sensitivity analysis etc. Results show that the new method can reconstruct the initial conditions or parameters of a nonlinear dynamical system very conveniently and accurately. Its another advantage is being very easy to implement with a high accuracy in gradient computation, so it is robust in the process of numerical optimization. The estimated initial states or parameters are convergent to real value in the cost of no more computations, when there are noises in the observations. But many tests are still needed to demonstrate the validity and advantages of the new data assimilation method, especially in more complex and realistic numerical prediction models of atmosphere and ocean.

Keywords: data assimilation, dual-number theory, gradient analysis, optimization

PACS: 05.45.-a, 02.30.Zz, 02.60.Pn

DOI: 10.7498/aps.64.130502

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 41475094, 41105063, 41375105) and the Young Innovation Science Foundation of CHREO (Grant Nos. GFZX04060103-5-19).

† Corresponding author. E-mail: caoxiaoqun@nudt.edu.cn