

海洋数值模拟中的伴随数据同化方法

陈耀登^{1,2},高玉芳¹

(1.河海大学水文水资源与水利工程科学国家重点实验室,江苏 南京 210098;2.河海大学海洋学院,江苏 南京 210098)

摘要:从伴随方程的推导、伴随数值模型的构造以及伴随数据同化中的最优化方法 3 个方面对伴随数据同化基本理论的研究现状进行了较为系统的归纳和评述;从优化初始状态、优化模式中不确定参数和优化开边界条件等 3 方面,综述了伴随法在海洋数值模拟中的应用.最后讨论了伴随法在海洋数值模拟应用中存在的问题,指出,对于伴随法用于数值模型的参数优化,只能对其在物理意义范围内进行适当调整和估计,而不能背离物理背景使目标函数最优.

关键词:海洋数值模拟;四维数据同化;伴随法

中图分类号: P731.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-198X(2007)05-0599-05

随着计算机和数值计算技术的发展,水流运动方程——水动力数值模拟一般通过数值计算的方法来求解.但在实际工作中,由于初始资料和边界条件的误差、数值计算方法的精度问题以及水流运动方程本身的不完善,数值模拟存在一定的偏差,尤其是海洋数值模拟的准确性更是受到多方面因素的影响.另一方面,随着卫星和雷达等观测技术的快速发展和应用,人们获取了大量时空分布的观测数据,这些数据作为对海洋各种现象相对“忠实”的记录,包含了海洋现象初始场和边界条件的信息,也包含了模式中一些参数的信息.为提高和改进海洋数值模拟精度,海洋数值模拟研究人员借鉴了大气研究中的四维数据同化思想^[1-2].

四维数据同化方法的基本思想是:最大限度地提取不同时空、不同观测手段获得的实测数据所包含的有效信息,通过某种分析标准或数学方法,实现数值模式和观测数据的有机结合,为数值模式提供初始场、边界条件,优化模式中的某些参数,以提高和改进海洋数值模式的性能.伴随法被认为是最有效的四维数据同化方法之一,近 10 多年来得到了广泛的研究和应用^[3-5].该方法在数学物理反问题的框架下,基于变分和最优化控制论的基本原理,建立模式结果与观测数据之差的目标函数,通过求解与海洋模式相对应的伴随方程,方便地计算出控制参数优化下降的梯度,调整和优化模式中的控制变量,使得目标函数最小,以获得优化的控制变量和相应的状态变量,从而达到伴随同化的目的.

本文对伴随法的基本理论及其在海洋数值模拟中的应用进行了归纳和评述,并指出其在应用中存在的问题.

1 伴随法基本理论

1.1 伴随法的简单描述

海洋模拟的数值模式可以表示成如下非线性方程:

$$\frac{dX(t)}{dt} = F(X(t), U) \quad (1)$$

式中: F ——海洋数值模拟非线性算子; $X(t)$ ——海洋数值模拟所要求的潮流场、温盐场等; U ——方程的模式参数、初始场或边界条件.用 $J(U)$ 表示模式计算值与观测值之差的目标泛函,伴随同化的目的就是使得计算值与观测值之间得到最佳拟合.对控制变量 U 进行最优选择:

$$U = \hat{U} - \varphi(\nabla_U J(U)) \quad (2)$$

收稿日期:2006-12-08

基金项目:水文水资源与水利工程科学国家重点实验室开放研究基金资助项目(2005407411);教育部科学技术研究重点资助项目(104104);江苏省普通高等学校高新技术产业发展资助项目(JH03-010)

作者简介:陈耀登(1980—),男,福建沙县人,博士研究生,主要从事河口海岸动力学研究.

式中: φ ——适当优化方法的算子; $\hat{U}$ ——控制变量的初始猜测; $\nabla_U J(U)$ —— $J(U)$ 的梯度.伴随法是在推导 $\nabla_U J(U)$ 的过程中自然引入的,经过推导 $\nabla_U J(U)$ 满足如下方程:

$$\begin{cases} -\frac{d[\nabla_U J(U)]}{dt} = \dot{F}^*(X(t))[\nabla_U J(U)] + \nabla_X J(X(t)) \\ \nabla_U J(U, 0) = 0 \end{cases} \quad (3)$$

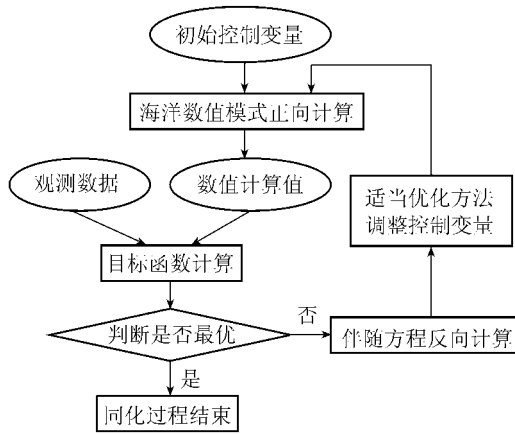


图1 伴随法操作步骤

Fig.1 Steps for adjoint method

式(3)即为伴随方程,其中 $\dot{F}^*(X(t))$ 为 $\dot{F}(X(t))$ 的gâteaux导数 $\dot{F}(X(t))$ 的伴随算子.可以看出,伴随法避免了直接求控制参数的导数,将问题转化成求解伴随方程的初值问题.由于伴随方程的初值问题既包括原始控制方程的伴随方程,又包括观测值和计算值的数据差异,因此 $\nabla_U J(U)$ 有机地结合了实测数据和原始控制方程的有效信息.伴随方法的操作步骤如图1所示.

1.2 伴随方程的推导

目前推导伴随方程的方法主要有2种:基于泛函分析理论的伴随算子法和Lagrange乘子法.伴随算子法由Dimet等^[6]首次引入气象学中.该方法借助伴随算子建立与控制方程相对应的伴随方程,然后通过求解伴随方程得到目标函数关于初始场的梯度.但伴随算子法还是有所局限^[7](a)只有线性算子才有伴随算子,因此必须先将数值模型线性化才能利用伴随算子进行

推导(b)现有理论框架只能对初始场进行反演,限制了其在参数估计、开边界反演等方面的应用. Dimet^[6]通过引入Lagrange乘子,将有约束问题转化为无约束问题,对目标泛函进行一阶变分即可求得伴随方程. Lagrange乘子法突破了伴随算子法只能对初始场进行反演的弊端,极大地简化了伴随方程的推导.但Lagrange乘子法得到的方程并没有“伴随”的概念,称之为“伴随方程”只是名称上的借用.

1.3 伴随数值模型的构造

对于伴随数值模型的构造,有2种方法(a)先对连续的正模型方程进行数值离散,然后从离散的正方程构造离散的伴随数值模型(称为“离散的伴随”)(b)先由正模型方程构造伴随方程,然后对伴随方程数值离散得到伴随数值模型(称为“伴随的离散”). Thacker等^[8]指出,建立伴随数值模型应该使用“离散的伴随”,理由是:观测结果是离散的,因此目标函数的建立必须使用离散模型;基于不同的方程进行离散,即使离散思路相同,也很难保证“伴随的离散”推导出来的伴随数值模型与正数值模型的伴随关系.“伴随的离散”推导出来的伴随数值模型并不是正数值模型的伴随.现在较多使用的“伴随码(adjoint code)”技术^[9-10]就是基于“离散的伴随”的思想.但是Ziv等^[11]通过对一维Burgers方程进行研究发现,一定程度上“伴随的离散”与“离散的伴随”2种方法是同样有效的, Schiller等^[12]甚至使用一个精度低于普通差分模型的“近似伴随模型(an approximate adjoint model)”,也取得了较好的效果.因此,过分强调“离散的伴随”是有疑问的;“离散的伴随”并不是逻辑上的必然^[13].海洋涡动黏性系数和风应力系数的伴随数据同化值试验^[14]表明,“伴随的离散”与“离散的伴随”都能取得同样好的结果,甚至“伴随的离散”有时还优于“离散的伴随”.

1.4 伴随数据同化中的最优化方法

伴随法需要利用某种最优化方法对控制参数进行校正.有学者对各种方法在伴随数据同化中的应用进行了分析^[15](a)最速下降法,具有较好的整体收敛性,其形式简单便于利用,起始点离极值点较远时非常有效,但接近极值点时收敛速度会慢下来(b)牛顿法具有二次收敛率,但要求储存Hessian矩阵,储存量太大,对于海洋伴随数据同化来说由于其模式较为复杂,牛顿法不是一个好的选择(c)共轭梯度法和有限内存拟牛顿法的收敛速度介于最速下降法和牛顿法之间,在目标函数二次性较强的区域具有较好的效果.以上几种算法,无论是下降方向还是步长,都各不相同,且不同算法的效率还依赖于它们所研究的特殊问题. Wang等^[16]指出,步长对于迭代收敛速度至关重要,一定程度上已成为控制算法效率成败的关键因素之一.最优步长的确定一般用单维搜索法.由于单维搜索法有时需要搜索许多次,每次搜索都需重新计算一次目标函数,也就需要积分一次正模式,计算量非常大.在实际应用中有学者略去一维搜索这一过程,事先直接取定步

长^[7],这一步长通常取在(0,1)之间^[17].有学者还把遗传算法用于伴随数据同化的研究中,取得了较好的效果^[18-19].

2 伴随法在海洋数值模拟中的应用

2.1 优化海洋数值模式的初始状态

Thacker等^[8]采用简单一维海洋模式,利用伴随法把海表面高度资料同化到模式中,得到优化的海表面高度的初始状态. Greiner等^[20]采用非线性的简化重力模式,运用伴随法同化卫星遥感资料,获得优化初始状态,用于模拟印度洋中上混合层的年变化.何柏荣等^[21]以一维水温模型为例,利用伴随法给水温的数值预报提供了较准确的初始场.马继瑞等^[22]采用中国近海海表面温度短期数值预报模式,将船舶测报海表面温度同化到该模型中,对海表面温度(SST)初始场进行了优化.尹训强等^[10]利用浅水潮波及其共轭模式进行了流速和水位的初始场优化试验.

2.2 优化海洋模式中的不确定参数

Yu等^[23]优化了风拖曳力系数和海洋涡黏性系数的垂直结构, Das等^[24]优化了底摩擦系数,讨论了不同的下降算法对结果的影响. Larder等^[25]给出了阿拉伯海湾中的底摩擦系数和对水深资料的修正量.吕咸青等^[26-27]利用伴随法将表层和次表层的观测资料同化到海洋的埃克曼层模型中,成功反演了海洋涡动黏性系数的分布和风应力拖曳系数,并对给定的底摩擦系数进行了校正,对水深进行了微调,试验结果较好地体现了渤海 M_2 潮波的特征.张继才等^[28]假定底摩擦系数具有空间分布特征,利用伴随法成功反演了给定的底摩擦系数的空间分布.

2.3 优化海洋模式的开边界条件

Lardner等^[29]通过理想试验,研究了将模拟潮位数据同化到半线性潮汐模型的伴随法,估计了潮汐开边界条件. Zhang等^[30-31]基于POM外模式,利用验潮站水位资料进行开边界估计,并在美国东海岸进行了实际应用,得到了比从全球潮波模型计算出的开边界更优的结果.朱江等^[32]通过理想区域的数值模拟试验,证明了用伴随法估计潮汐开边界的可行性和有效性,同时指出足够的观测数据是正确反演出开边界的前提条件.吕咸青等^[33]用伴随法,通过渤海沿岸19个验潮站的调和常数来反演渤海海域的开边界条件,数值模拟结果正确地反映了渤海 M_1 和 M_2 潮波的基本特征.

3 伴随法在海洋数值模拟应用中的几点讨论

a. 海洋数值模拟中的伴随法是借鉴气象数值预报中的伴随法发展起来的.大气和海洋介质虽同属流体,但浅水流动天然起伏的地形和曲折的边界条件对水流的影响较大,而气象预报的时空尺度相对较大,地形和边界对结果的影响较小.另外,在对实际的水动力学流场进行数值模拟时,往往会碰到区域边界形状复杂和物理变量在较小区域内变化较大,甚至出现钱塘江涌潮等间断现象.从数学上来说,这种间断现象是非线性双曲型方程(如浅水方程)解的间断性的反映.因此,海洋数值模拟研究人员应深入开展基于高精度、高分辨率的数值模型伴随法的研究.

b. 利用伴随法进行数据同化时,每求1次目标函数,都需要正向积分海洋数值模型和反向积分伴随模型一次,计算量极大,而且每次进行正向和反向计算时都需要存储同化时段内各个时刻的计算值.海量存储对计算机容量和存储速度的要求很高.在现有伴随法的理论框架下,将伴随法并行化,将是提高伴随法计算速度、解决伴随法海量数据存储的一个有效方法.

c. 伴随法是在数学物理反问题的框架上处理问题,而对于数学物理反问题来说,解往往是不适定的:即解不一定唯一,若解唯一,也不一定稳定,这给该类问题的求解带有很大难度.通过二阶伴随模型的计算可得到目标函数关于控制参数的二阶导数信息(即目标函数的Hessian矩阵),以用来研究伴随优化过程中解的存在性、唯一性等^[34].如果每次同化迭代的Hessian矩阵的特征值均为正数,说明Hessian矩阵是正定的,也就可以证明最小值是唯一的,即伴随法的最优解是唯一的.同化开始阶段参数下降比较快,正是因为Hessian矩阵的条件数在开始时变化比较大,借此可以研究伴随法的收敛性.

4 结 语

伴随法将观测值和数值模式计算值的数据差异加到伴随方程上作为驱动,通过计算伴随方程得到控制

变量的下降梯度方向,逐步地进行优化计算,最终得到数值模式最优的控制变量,从而改进了数值模拟精度。在海洋数值模拟的大量应用中,伴随法的优越性已经得到了充分体现。

需要指出的是,对于伴随法用于数值模型的参数优化,只能对参数在其物理意义范围内进行适当调整和“估计”。如果在求解目标函数最优的过程中对参数的校正使得参数超出了其物理背景许可的范围,则需要查找数值模型本身等方面是否存在问题,而不能背离物理背景对底摩擦系数、底部地形等参数进行“盲目确定”和“大胆修正”来使得目标函数最优,这样做看似“提高”了模型精度、“改进”了系统性能,但是这种做法往往导致错误的海洋物理过程,一定程度上,这种做法已经将数据同化引入了错误方向。

参考文献:

- [1] HOTEIT I, PHAM D T, BLUM J. A simplified reduced order Kalman filtering and application to altimetric data assimilation in Tropical Pacific[J]. *Journal of Marine Systems*, 2002, 36: 101-127.
- [2] PARK S K, ZUPANSKI D. Four-dimensional variational data assimilation for mesoscale and storm-scale applications[J]. *Meteorol Atmospheres Physics*, 2003, 82: 173-208.
- [3] 乔方利, ZHANG Shao-qin. 现代海洋大气资料同化方法的统一性及其应用进展[J]. *海洋科学进展*, 2002, 20(4): 79-93.
- [4] 王东晓, 朱江. 伴随方法在海洋数值模式中的应用[J]. *地球物理学进展*, 1997, 12(1): 98-107.
- [5] NAVON M. Practical and theoretical aspects of adjoint parameter estimation and identifiability in metrology and ocean[J]. *Dynamics of Atmospheres and Oceans*, 1997, 27(1): 59-79.
- [6] DIMET L F X, TALAGRAND O. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations[J]. *Theoretical Aspects, Tellus*, 1986, 38(A): 97-110.
- [7] 吕咸青. 海洋数值建模中伴随方法研究[D]. 青岛: 中国科学院海洋研究所, 2001.
- [8] THACKER W C, LONG R B. Fitting dynamic to data[J]. *Journal of Geophys Research*, 1988, 93: 1227-1240.
- [9] GIERING R, KAMINSKI T. Recipes for adjointcode construction[J]. *Transactions on Mathematical Software*, 1998, 24: 457-474.
- [10] 尹训强, 杨永增, 乔方利. 浅水潮波模式变分同化共轭码技术研究[J]. *海洋科学进展*, 2003, 21(4): 414-423.
- [11] ZIV S, ELI T. Finite difference of adjoint or adjoint of finite difference[J]. *Monthly Weather Review*, 1997, 125(12): 3373-3378.
- [12] SCHILLER A, WILLEBR J. A technique for the determination of surface heat and freshwater fluxes from hydrographic observations using an approximate adjoint ocean circulation mode[J]. *Journal of Marine Research*, 1995, 53: 433-451.
- [13] 吕咸青, 吴自库, 谷艺. 数据同化中的伴随方法的有关问题的研究[J]. *应用数学和力学*, 2004, 25(6): 581-590.
- [14] 吕咸青, 刘文剑. 数据同化中的伴随方法及其有关问题的研究[J]. *海洋科学*, 2001, 25(3): 44-50.
- [15] 王云峰, 伍荣生, 王元, 等. 变分连续同化中优化步长的推导方法及数值试验[J]. *大气科学*, 2004, 28(3): 415-423.
- [16] WANG Yun-feng, WU Rong-sheng. A simple method to calculate the optimal step size in 4DVAR[J]. *Advanced Atmospheres Science*, 2000, 17(3): 433-444.
- [17] 韩桂军. 伴随法在潮汐和海温数值计算中的应用研究[D]. 青岛: 中国科学院海洋研究所, 2001.
- [18] AHRENS B. Variational data assimilation for a Lorenz model using a non-standard genetical gorithm[J]. *Meteorology and Atmospheric Physics*, 1999, 70: 227-238.
- [19] 胡娅敏, 丁一汇, 沈桐立. 基于遗传算法的四维变分资料同化技术的研究[J]. *大气科学*, 2006, 30(2): 248-256.
- [20] GREINER E, PERIGAUD C. Assimilation of geosat altimetric data in a nonlinear Reduced-Gravity Model of the Indian Ocean part1: adjoint approach and model-data consistency[J]. *Journal of Physical Oceanography*, 1994, 24: 1783-1804.
- [21] 何柏荣, 马继瑞, 韩桂军, 等. 海水温度垂直分布预报数据同化的离散伴随算子法[J]. *计算物理*, 2000, 17(5): 553-559.
- [22] 马继瑞, 韩桂军, 李冬. 变分伴随数据同化在海表温度预报中的应用研究[J]. *海洋学报*, 2002, 24(5): 1-7.
- [23] YU L S, O'BRIEN J J. Variational estimation of the wind stress drang coefficient and the oceanic eddy viscosity profile[J]. *Journal of Physical Oceanography*, 1991, 21: 709-719.
- [24] DAS S K, LARDNER R W. On the estimation of parameters of hydraulic models by assimilation of periodic tidal data[J]. *Journal of Geophysical Research*, 1991, 96: 15187-15196.
- [25] LARDNER R W. Optimal estimation of parameters for a two-dimensional hydrodynamica model of the Arabian Gulf[J]. *Journal of Geophysical Research*, 1993, 98(C10): 18299-18242.
- [26] 吕咸青. 数据同化反演风应力拖曳系数以及垂向涡动黏性系数的分布[J]. *海洋学报*, 2001, 23(1): 13-20.
- [27] 吕咸青, 方国洪. 渤海 M_2 分潮的伴随模式数值实验[J]. *海洋学报*, 2002, 24(1): 17-24.

[28] 张继才 , 吕咸青 . 空间分布底摩擦系数的伴随法反演研究 [J]. 自然科学进展 , 2005 , 15 (9) : 1086-1093.

[29] LARDNER R W. Optimal control of open boundary conditions for a numerical tidal model [J]. Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering , 1993 , 102 : 367-387.

[30] ZHANG A , PARKER B B , WEI E. Assimilation of water level data into a coastal hydrodynamic model by an adjoint optimal technique [J]. Continental Shelf Research , 2003 (22) : 1909-1934.

[31] ZHANG A , WEI E , PARKE B B. Optimal estimation of tidal open boundary conditions using predicted tides and adjoint data assimilation technique [J]. Continental Shelf Research , 2003 (23) : 1055-1070.

[32] 朱江 , 曾庆存 , 郭冬建 , 等 . 利用伴随算法从岸边潮位站资料估计近岸模式的开边界条件 [J]. 中国科学 : D 辑 , 1997 , 27 (5) : 80-86.

[33] 吕咸青 , 方国洪 . 渤海开边界潮汐的伴随法反演 [J]. 海洋与湖沼 , 2002 , 33 (2) : 113-120.

[34] WANG Zhi , NAVON I M , DIMET L F X , et al. The second order adjoint analysis : theory and applications [J]. Meteorol Atmospheres Physics , 1992 , 50 : 3-20.

Adjoint data assimilation method for marine numerical simulation

CHEN Yao-deng^{1, 2} , GAO Yu-fang¹

(1. State Key Laboratory of Hydrology-Water Resources and Hydraulic Engineering ,
Hohai University , Nanjing 210098 , China ;
2. College of Ocean , Hohai University , Nanjing 210098 , China)

Abstract : The current research on the basic theory about the derivation of adjoint equations , the construction of numerical models , and the optimization method for adjoint data assimilation was systematically summarized. The application of the adjoint method for initial state optimization , uncertain parameter optimization , and open boundary optimization in marine numerical simulation was reviewed , and some related problems were discussed. It is pointed out that , when the adjoint method is used for parameter optimization of the numerical model , the parameters should be adjusted and estimated properly according to their physical significances , and the optimization of objective function inconsistent with the physical background should be avoided.

Key words : marine numerical simulation ; 4D data assimilation ; adjoint method