

二阶伴随模型的构造

陈耀登^{1 2}, 王如云¹, 高玉芳³

(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. 南京信息工程大学海洋科学系 江苏 南京 210044 3. 南京信息工程大学应用气象学系 江苏 南京 210044)

摘要 将 Lagrange 乘子法引入二阶伴随模型的构造 , 将正模型和一阶伴随模型构建到一个目标函数中 , 通过对目标函数取一阶变分直接得到了二阶伴随方程 , 简化了二阶伴随模型的构造 . 对 Lagrange 乘子法构造一阶、二阶伴随模型的过程进行了讨论 , 并以非线性浅水波方程为例 , 利用 Lagrange 乘子法对一阶和二阶伴随模型进行了推导 .
关键词 数据同化 ; 二阶伴随模型 ; Lagrange 乘子
中图分类号 : P731.2 **文献标识码** : A **文章编号** : 1000-1980(2008)02-0253-05

伴随法作为最优的数据同化方法之一在大气和海洋研究中得到了广泛重视^[1]. 伴随法通过一阶伴随模型的计算可得到目标函数关于控制参数(初始场或模式参数等) 的梯度 , 即一阶导数信息 , 从而可以利用一阶伴随模型来优化初始场和模式参数 . 而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) , 从而可用于研究伴随法优化过程中解的存在性、唯一性及参数的敏感性等^[2-5].

不少学者利用伴随算子和 Gâteaux 微分理论 , 对二阶伴随模型的构造进行了研究^[2-3, 6]. 但由于只有线性算子才有伴随算子^[7] , 基于伴随算子法进行伴随模型的推导 , 必须先对正模型和一阶伴随模型利用 Gâteaux 微分进行线性化 , 然后再利用伴随算子构造伴随模型 , 这个过程不仅繁琐 , 且易出错 . Le Dimet 等^[8-9]提出了利用 Lagrange 乘子法构造一阶伴随模型的方法并对其进行了应用 , 简化了一阶伴随模型的构造 . 本文将 Lagrange 乘子法引入二阶伴随模型的构造 , 通过 Lagrange 乘子将正模型和一阶伴随模型构建到 1 个目标函数中 , 对目标函数取一阶变分直接得到了二阶伴随方程 , 简化了二阶伴随模型的构造 .

1 二阶伴随模型

1.1 伴随算子法

设正模型方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial U(p, t)}{\partial t} = F(U(p, t)) \\ U(p, 0) = U_0 \end{cases} \tag{1}$$

其中 $U(p, t)$ 是模型的状态变量 , 且 U 依赖于 p . 定义目标泛函

$$J(U) = \frac{1}{2} \int_0^T \langle U - U_{\text{obs}}, U - U_{\text{obs}} \rangle dt \tag{2}$$

其中 U 为计算值 , U_{obs} 为实测值 , 并假定实测值 U_{obs} 关于空间和时间是连续的^[10] . 同化的目的是实测值和计算值达到最大程度的统一 , 即 J 取得最小值 .

由于伴随算子基于线性空间 , 利用 Gâteaux 微分^[7] , 先将正模型方程切线性化 :

$$\begin{cases} \frac{d\hat{U}}{dt} = \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right] \hat{U} \\ \delta U|_{t_0} = \mu \end{cases} \tag{3}$$

收稿日期 2007-04-06
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(2005407411) ; 教育部科学技术研究重点项目(104104) ; 江苏省普通
高等学校高新技术产业发展项目(JH03-010) ; 南京信息工程大学科研基金(S8107327001)
作者简介 陈耀登 (1980—) , 男 , 福建沙县人 , 博士 , 主要从事海洋动力学研究 .

而目标泛函沿扰动方向 μ 的 Gâteaux 微分为

$$J(U) = \frac{1}{2} \int_0^T \langle U - U_{\text{obs}}, \widehat{U} \rangle dt \quad (4)$$

给定一变量 $U^*(t)$ 利用伴随算子^[8], 令 $U^*(T) = 0$, 可得

$$\int_0^T \langle \frac{dU^*}{dt} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right]^T U^*, \widehat{U} \rangle dt = 0 \quad (5)$$

要使 J 取得最小值必有 $J(U) = 0$ 综合式(4)和(5), 可得

$$\begin{cases} -\frac{\partial U^*}{\partial t} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right]^T U^* - (U - U_{\text{obs}}) = 0 \\ U^*(T) = 0 \end{cases} \quad (6)$$

其中 $\left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right]^T$ 为 $\left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right]$ 的转置, $\left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right]$ 为 $F(U)$ 关于 U 的 Jacobian 行列式. 方程(6)即为正模型的一阶伴随方程, U^* 为 U 的一阶伴随算子.

为研究伴随法优化过程中解的存在性、唯一性及参数的敏感性等, 需要知道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), 而通过二阶伴随方程的计算即可得到 Hessian 矩阵. 为推导二阶伴随方程, 利用 Gâteaux 微分, 将一阶伴随方程切线性化:

$$\frac{\partial \widehat{U}^*}{\partial t} + \left[\frac{\partial^2 F(U)}{\partial U^2} \widehat{U} \right]^T U^* + \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right]^T \widehat{U}^* = (U - U_{\text{obs}}) \quad (7)$$

利用伴随算子概念, 类似一阶伴随方程推导, 可得二阶伴随方程

$$\begin{cases} -\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right] \bar{U} - \left[\frac{\partial^2 F(U)}{\partial U^2} \widehat{U} \right] U^* + \widehat{U} = 0 \\ \bar{U}|_T = 0 \end{cases} \quad (8)$$

式中 $\bar{U}$ 为 U 的二阶伴随算子.

1.2 Lagrange 乘子法

伴随同化是一个带有约束条件的泛函变分问题, 通过拉格朗日乘子法可为泛函解除约束条件成为无约束变分. 引入 $U^*(t)$ 作为约束方程(1)的拉格朗日乘子, 构造目标泛函

$$I(U) = J(U) + \int_0^T \langle U^*, \frac{\partial U}{\partial t} - F(U) \rangle dt \quad (9)$$

由泛函极值条件知, 要使泛函取得极值必有 $\nabla_U L = 0$, 另一方面由 $\delta L = (\nabla_U L, \delta U)$, 有

$$\begin{aligned} \delta I(U) = \int_0^T \langle -\frac{\partial U^*}{\partial t} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right]^T U^* + \\ (U - U_{\text{obs}}), \delta U \rangle dt + \langle U^*, \delta U \rangle|_T = 0 \end{aligned} \quad (10)$$

于是可得

$$\begin{cases} -\frac{\partial U^*}{\partial t} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right]^T U^* + (U - U_{\text{obs}}) = 0 \\ U^*(T) = 0 \end{cases} \quad (11)$$

且 $\nabla_U I(U) = U^*(0)$. 方程(6)即为正模型的一阶伴随方程, U^* 为 U 的一阶伴随算子.

根据变分理论, 可以通过 $\nabla^2 L$, 即目标函数的 Hessian 矩阵来研究目标函数 $I(U)$ 的极值性质, 令 $H = \nabla^2 L$. 通过拉格朗日乘子 $\bar{U}$ 再次把方程(1)吸收到目标泛函中, 建立目标泛函

$$\alpha(U) = \delta I(U) + \int_0^T \langle \bar{U}, \frac{\partial U}{\partial t} - F(U) \rangle dt \quad (12)$$

则有

$$\delta^2 I(U) = \delta[\delta I(U)] = \delta[\alpha(U)] =$$

$$\delta \left[\delta I(U) + \int_0^T \langle \bar{U}, \frac{\partial U}{\partial t} - F(U) \rangle dt \right] =$$

$$\delta \left[\int_0^T \langle -\frac{\partial U^*}{\partial t} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right]^T U^* - (U - U_{\text{obs}}), \delta U \rangle dt + \int_0^T \langle \bar{U}, \frac{\partial U}{\partial t} - F(U) \rangle dt \right] \quad (13)$$

式(13)看成引入 2 个乘子 δU 和 $\bar{U}$ 将正模型和一阶伴随模型构建到一个目标函数中,为表示方便将 δU 写成 $\widehat{U}$. 同样,要使泛函取得极值必有 $\delta G = 0$,即

$$\delta \alpha(U) = \int_0^T \left\langle -\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right] \bar{U} - \left[\frac{\partial^2 F(U)}{\partial U^2} \widehat{U} \right] U^* + \widehat{U}, \delta U \right\rangle dt + \left\langle \bar{U}, \delta U \right\rangle \Big|_T + \int_0^T \left\langle -\frac{d\widehat{U}}{dt} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right] \widehat{U}, \delta U^* \right\rangle dt + \left\langle \widehat{U}, \delta U \right\rangle \Big|_T = 0 \tag{14}$$

令 δU 和 δU^* 的系数分别等于零,再加上初始条件,有

$$\begin{cases} -\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right] \bar{U} - \left[\frac{\partial^2 F(U)}{\partial U^2} \widehat{U} \right] U^* + \widehat{U} = 0 \\ \bar{U} \Big|_T = 0 \end{cases} \tag{15}$$

$$\begin{cases} -\frac{\partial \widehat{U}}{\partial t} - \left[\frac{\partial F(U)}{\partial U} \right] \widehat{U} = 0 \\ \widehat{U} \Big|_T = \mu \end{cases} \tag{16}$$

方程(15)就是二阶伴随方程,而式(10)正是正模型的线性化表达式.可以看出,利用 Lagrange 乘子法二阶伴随方程和线性化表达式是一次性获得的,简化了二阶伴随模型的构造.

利用二阶伴随模型可以较准确地计算出目标函数关于控制参数的 Hessian 矩阵^[38]:以扰动 μe_i (其中 $i = 1, 2, \dots, n$, n 表示控制参数个数, e_i 为第 i 个元素为 1 其余为 0 的单位矢量)求解方程(16)和一阶伴随方程(11),然后计算二阶伴随模型(15),二阶模型的解就是 Hessian 矩阵的第 i 列, $i = 1, 2, \dots, n$. 令 H 为 Hessian 矩阵,可用公式表示为

$$He_i = U^{**}(0) \tag{17}$$

2 非线性浅水波方程的一、二阶伴随模型

二维深度平均的浅水波方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial Du}{\partial x} + \frac{\partial Dv}{\partial y} = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - fv + g \frac{\partial \zeta}{\partial x} + C_b u = 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + fu + g \frac{\partial \zeta}{\partial y} + C_b v = 0 \end{cases} \tag{18}$$

$$D = h + \zeta$$

初始场 $\zeta|_{T_0} = u|_{T_0} = v|_{T_0} = 0$

式中: D ——总水深; x, y ——东、北方向; u, v ——水流东、北分量; f ——柯氏力参量; C_b ——底摩擦系数. 构造目标泛函

$$J = \frac{1}{2} \iiint_{xyt} \left[(\zeta - \zeta_{\text{obs}})^2 + (u - u_{\text{obs}})^2 + (v - v_{\text{obs}})^2 \right] dx dy dt \tag{19}$$

式中: $\zeta_{\text{obs}}, u_{\text{obs}}, v_{\text{obs}}$ ——实测值,假定其关于时间和空间是连续的; ζ, u, v ——同化值. 引入 $\zeta^*(x, y, t), u^*(x, y, t), v^*(x, y, t)$ 作为约束方程(11)的拉格朗日乘子,目标泛函可以写成

$$L = \iiint_{xyt} \left[\zeta^* \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial Du}{\partial x} + \frac{\partial Dv}{\partial y} \right) + u^* \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - fv + g \frac{\partial \zeta}{\partial x} + C_b u \right) + v^* \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + fu + g \frac{\partial \zeta}{\partial y} + C_b v \right) \right] dx dy dt + J \tag{20}$$

根据 $\delta L = 0$ 并利用边界上 $(\delta \zeta, \delta u, \delta v) = 0$ 及正过程初始场 $\zeta|_{T_0} = u|_{T_0} = v|_{T_0} = 0$ 并令 $\zeta^*|_{T_1} = u^*|_{T_1} = v^*|_{T_1} = 0$,可得

$$\begin{cases} \frac{\partial \zeta^*}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta^*}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta^*}{\partial y} + \frac{\partial gu^*}{\partial x} + \frac{\partial gv^*}{\partial y} = \zeta - \zeta_{\text{obs}} \\ \frac{\partial u^*}{\partial t} + D \frac{\partial \zeta^*}{\partial x} + \frac{\mathcal{X} u^* v}{\partial y} + u \frac{\partial u^*}{\partial x} - v^* \frac{\partial v}{\partial x} - u^* C_b - f v^* = u - u_{\text{obs}} \\ \frac{\partial v^*}{\partial t} + \frac{\mathcal{X} v^* u}{\partial x} + D \frac{\partial \zeta^*}{\partial y} - u^* \frac{\partial u}{\partial y} + v \frac{\partial v^*}{\partial y} - v^* C_b + f u^* = v - v_{\text{obs}} \end{cases} \quad (21)$$

式(21)就是浅水波方程的一阶伴随模型, ζ^*, u^*, v^* 是 ζ, u, v 的伴随算子, 初始条件为 $\zeta^*|_{T_1} = u^*|_{T_1} = v^*|_{T_1} = 0$.

对于二阶伴随模型的构造, 引入 $\zeta^{**}(x, y, t), u^{**}(x, y, t), v^{**}(x, y, t)$ 和 $\hat{\zeta}(x, y, t), \hat{u}(x, y, t), \hat{v}(x, y, t)$ 分别作为方程组(18)和(21)的乘子, 并构建目标泛函

$$\begin{aligned} G = & \iiint_{xyt} \left[\zeta^{**} \left(\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial Du}{\partial x} + \frac{\partial Dv}{\partial y} \right) + u^{**} \left(\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - f v + g \frac{\partial \zeta}{\partial x} + C_b u \right) + \right. \\ & v^{**} \left(\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + f u + g \frac{\partial \zeta}{\partial y} + C_b v \right) + \\ & \hat{\zeta} \left(\frac{\partial \zeta^*}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta^*}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta^*}{\partial y} + g \frac{\partial u^*}{\partial x} + g \frac{\partial v^*}{\partial y} - (\zeta - \zeta_{\text{obs}}) \right) + \\ & \hat{u} \left(\frac{\partial u^*}{\partial t} + D \frac{\partial \zeta^*}{\partial x} + \frac{\mathcal{X} u^* v}{\partial y} + u \frac{\partial u^*}{\partial x} + v^* \frac{\partial v}{\partial x} - u^* C_b - v^* f - (u - u_{\text{obs}}) \right) + \\ & \left. \hat{v} \left(\frac{\partial v^*}{\partial t} + \frac{\mathcal{X} v^* u}{\partial x} + D \frac{\partial \zeta^*}{\partial y} - u^* \frac{\partial u}{\partial y} + v \frac{\partial v^*}{\partial y} - v^* C_b + f u^* - (v - v_{\text{obs}}) \right) \right] dx dy dt \quad (22) \end{aligned}$$

对上式取一阶变分, 并令 $\zeta^{**}|_{T_1} = u^{**}|_{T_1} = v^{**}|_{T_1} = 0, \hat{\zeta}|_{T_1} = \hat{u}|_{T_1} = \hat{v}|_{T_1} = 0$, 得到

$$\begin{cases} \frac{\partial \zeta^{**}}{\partial t} + u \frac{\partial \zeta^{**}}{\partial x} + v \frac{\partial \zeta^{**}}{\partial y} + g \frac{\partial u^{**}}{\partial x} + g \frac{\partial v^{**}}{\partial y} = \hat{u} \frac{\partial \zeta^*}{\partial x} + \hat{v} \frac{\partial \zeta^*}{\partial y} - \hat{\zeta} \\ \frac{\partial u^{**}}{\partial t} + u \frac{\partial u^{**}}{\partial x} + \frac{\mathcal{X} u^{**} v}{\partial y} - v^{**} \frac{\partial v}{\partial x} - C_b u^{**} - f v^{**} + D \frac{\partial \zeta^{**}}{\partial x} = \\ \hat{u} \frac{\partial u^*}{\partial x} - v^* \frac{\partial \hat{v}}{\partial x} + \frac{\mathcal{X} \hat{v} u^*}{\partial y} + \hat{\zeta} \frac{\partial \zeta^*}{\partial x} - \hat{u} \\ \frac{\partial v^{**}}{\partial t} - u^{**} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\mathcal{X} v^{**} u}{\partial x} + v \frac{\partial v^{**}}{\partial y} - C_b v^{**} + f u^{**} + D \frac{\partial \zeta^{**}}{\partial y} = \\ \frac{\mathcal{X} \hat{u} v^*}{\partial x} - u^* \frac{\partial \hat{u}}{\partial x} + \hat{v} \frac{\partial v^*}{\partial y} + \hat{\zeta} \frac{\partial \zeta^*}{\partial y} - \hat{v} \end{cases} \quad (23)$$

$$\begin{cases} -\frac{\partial \hat{\zeta}}{\partial t} - \frac{\mathcal{X} \hat{\zeta} u}{\partial x} - \frac{\mathcal{X} \hat{\zeta} v}{\partial y} - \frac{\mathcal{X} D \hat{u}}{\partial x} - \frac{\mathcal{X} D \hat{v}}{\partial y} = 0 \\ -\frac{\partial \hat{u}}{\partial t} - \frac{\mathcal{X} \hat{u} u}{\partial x} - v \frac{\partial \hat{u}}{\partial y} - \hat{v} \frac{\partial u}{\partial y} - \hat{u} C_b + \hat{v} f - g \frac{\partial \hat{\zeta}}{\partial x} = 0 \\ -\frac{\partial \hat{v}}{\partial t} - u \frac{\partial \hat{v}}{\partial x} - \hat{u} \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\mathcal{X} \hat{v} v}{\partial y} - \hat{v} C_b - \hat{u} f - g \frac{\partial \hat{\zeta}}{\partial y} = 0 \end{cases} \quad (24)$$

方程(23)(24)的初始条件分别为 $\zeta^{**}|_{T_1} = u^{**}|_{T_1} = v^{**}|_{T_1} = 0, (\hat{\zeta}|_0, \hat{u}|_0, \hat{v}|_0)$ 为初始场扰动. 方程(23)就是浅水波方程的二阶伴随模型, $\zeta^{**}, u^{**}, v^{**}$ 就是 ζ, u, v 的二阶伴随算子, 这与 Wang 等^[3]利用伴随算子法得到的二阶伴随模型是一致的.

3 结 语

本文通过引入 Lagrange 乘子将正模型和一阶伴随模型构建到一个目标函数中, 对目标函数取一阶变分, 直接得到了二阶伴随模型. 从推导过程可以看出, 利用本文方法构造伴随模型, 与前人利用伴随算子和

Gâteaux 微分理论得到的伴随模型是一致的. 利用本文方法 ,对二阶伴随模型的构造无须对模型进行线性化 , 所要做的仅是对 Lagrange 函数取一阶变分 ,简化了构造过程 .

致谢 :感谢河海大学理学院邓述渝和李晓君老师提供的帮助 !

参考文献 :

[1] 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(6) :581-590.
[2] 韩桂军 ,何柏荣 ,马继瑞 ,等 . 关于二阶伴随模型的理论研究 [J]. 海洋学报 , 2000 ,2(3) :15-19.
[3] WANG Zhi ,NAVON I M ,LE DIMET F X ,et al. The second order adjoint analysis :theory and applications[J]. Meteorol Atmos Phys , 1992 ,50 :3-20.
[4] NABON I M ,ZOU X L ,JOHNSON K ,et al. Variational data assimilation with an adiabatic version of the NMC spectral mode[J]. Mon Wea Rev ,1992 ,120 :1433-1466.
[5] WANG Z ,KELVIN K D ,WHITE L. The adjoint Newton algorithm for large-scale unconstrained optimization in meteorology applications [J]. Computational Optimization and Applications ,1998 ,10 :283-320.
[6] 朱江 ,曾庆存 ,郭冬建 ,等 . IAP 正压模式的伴随模式和二阶伴随模式的构造 [J]. 中国科学 :D 辑 ,1997 ,27(3) :277-283.
[7] 雷晋干 ,陈铭俊 . 数值分析的泛函方法 [M]. 北京 :高等教育出版社 ,1995.
[8] LE DIMET F X ,TALAGRAND O. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations[J]. Theoretical Aspects ,Tellus ,1986 ,38A :97-110.
[9] THACKER W C ,LONG R B. Fitting dynamic to data[J]. Journal of Geophys ,Research ,1988 ,93 :1227-1240.
[10] 黄思训 ,伍荣生 . 大气科学中的数学物理问题 [M]. 北京 :气象出版社 ,2001 .

Construction of a second order adjoint model

CHEN Yao-deng^{1 ,2} , WANG Ru-yun¹ , GAO Yu-fang³

- (1. State Key Laboratory of Hydrology-Water Resources and Hydraulic Engineering , Hohai University , Nanjing 210098 , China ;
2. Department of Ocean Science , Nanjing University of Information Science and Technology , Nanjing 210044 , China ;
3. Department of Applied Meteorology , Nanjing University of Information Science and Technology , Nanjing 210044 , China)

Abstract : A second order adjoint model (SOA model) was developed based on the theory of Lagrange multiplier. The forward model and first order adjoint model (FOA model) were introduced into an objective function. The SOA model can be obtained from the first order variation of the objective function. This simple construction process of FOA and SOA model was analyzed in detail and used in the construction of FOA and SOA model of shallow water equations.

Key words : data assimilation ; second order adjoint model ; Lagrange multiplier