

УДК 519.6, 551.46

## СОПРЯЖЕННЫЕ УРАВНЕНИЯ И МЕТОДЫ ВАРИАЦИОННОГО УСВОЕНИЯ ДАННЫХ В ЗАДАЧАХ ГЕОФИЗИЧЕСКОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

© 2025 г. В. И. Агошков, В. Б. Залесный, В. П. Шутяев\*, Е. И. Пармузин, Н. Б. Захарова

*Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука  
Российской академии наук, ул. Губкина, 8, Москва, 119333 Россия*

*\*e-mail: victor.shutyayev@mail.ru*

Поступила в редакцию 20.06.2024 г.

После доработки 17.12.2024 г.

Принята к публикации 05.03.2025 г.

Представлено современное состояние исследований в области сопряженных уравнений и вариационного усвоения данных наблюдений для модели динамики океана, развиваемой в ИВМ РАН. Разработанная технология четырехмерного вариационного усвоения данных (4D-Var) базируется на методе многокомпонентного расщепления математической модели динамики океана и минимизации функционала стоимости, связанного с данными наблюдений, путем решения системы оптимальности, включающей сопряженные уравнения и ковариационные матрицы ошибок наблюдений и начального приближения. Предложены эффективные алгоритмы решения вариационных задач усвоения данных на основе современных итерационных процессов со специальным выбором итерационных параметров, а также алгоритмы исследования чувствительности характеристик модели к ошибкам данных наблюдений. Методология иллюстрируется для модели гидротермодинамики Черного моря с вариационным усвоением данных для восстановления тепловых потоков на поверхности моря.

**Ключевые слова:** сопряженные уравнения, оптимальное управление, вариационное усвоение данных наблюдений, чувствительность, модель гидротермодинамики моря

**DOI:** 10.31857/S0002351525030048

### ВВЕДЕНИЕ

Метод сопряженных уравнений интенсивно развивается в последние годы и все более активно проникает в различные области математики, математической физики и их приложений. Особое место он занимает при решении широкого класса прямых и обратных задач, описываемых сложными математическими моделями. Основная идея метода состоит в том, что для исходной системы уравнений строится сопряженная система и поставленная проблема изучается с использованием решений прямой и сопряженной задачи. Развитие метода сопряженных уравнений в значительной степени основано на трудах Гурия Ивановича Марчука в течение его 65-летней научной деятельности. Развиваемая им и его научной школой методология решения задач математической физики с помощью те-

ории сопряженных уравнений применяется к требующим глубокого анализа сложным системам, с помощью которых изучаются проблемы глобальных изменений климата, охраны окружающей среды, атомной энергетики, иммунологии, сохранения биосферы с учетом интенсивного развития промышленности и многие другие. В рамках единого подхода формулируются новые постановки задач, стимулируемые развитием новых технологий. Становится необходимым совместный анализ модельных решений и данных измерений, например спутниковых; поиск решения обратных задач — начальных и граничных условий; оценка функционалов от решения прямых и обратных задач. Объединяются в общую сложную систему проблемы локальных и глобальных возмущений и чувствительности моделей к входным данным.

Все это требует комплексного изучения больших систем с применением теории сопряженных уравнений. Именно эти сложные системы и теория чувствительности в применении к их исследованию дают новый импульс развитию теории сопряженных уравнений.

Теория чувствительности на основе сопряженных уравнений может быть применена не только к ретроспективному изучению процессов, описываемых математическими моделями, но и к исследованию самих моделей, реализуемых с помощью современных вычислительных технологий. Если к этому добавить проблему четырехмерного анализа данных наблюдений и решение обратных задач, то становится ясным большое значение сопряженных задач в современной науке.

Первоначально определенные Лагранжем сопряженные операторы нашли глубокое теоретическое обоснование и широкое применение при решении многих задач математической физики. Возможно, впервые значение теории сопряженных уравнений было оценено физиками при развитии квантовой механики. Уравнение Шредингера потребовало развития аппарата самосопряженных расширений симметрических операторов. Здесь самосопряженные уравнения становятся необходимым математическим аппаратом для формулирования теории малых возмущений в спектральных проблемах. Важный этап активного интереса к сопряженным уравнениям и теории малых возмущений относится к теории ядерных реакторов. Сложные задачи теории переноса нейтронов с замедлением их в средах потребовали формулировки сопряженных уравнений и решения основных и сопряженных уравнений для оценки первого собственного числа спектральной задачи, связанной с реализацией стационарной цепной реакции. Созданная здесь на базе основных и сопряженных уравнений реактора теория малых возмущений сыграла большую роль в развитии физики реакторов и в реализации проектов атомных электростанций.

В дальнейшем было дано развитие теории сопряженных задач по отношению к заданным функционалам для некоторых классов задач математической физики. Оно оказалось плодотворным и для многих других направлений науки. В результате появились общие подходы к исследованию сложных систем и математи-

ческих моделей. Разработке этих подходов в различных областях математики и ее приложений посвящены многолетние исследования Г.И. Марчука и его научной школы. Они относятся к проблемам ядерной энергетики, охраны окружающей среды, теории климата и его изменений, математическим проблемам обработки информации со спутников, математическим моделям в иммунологии и др.

Вместе с развитием метода сопряженных уравнений формировался рациональный подход к решению обратных задач и к планированию математического эксперимента. Во многом благодаря работам Г.И. Марчука и его научной школы теория сопряженных уравнений стала одним из наиболее мощных математических средств изучения разнообразных физических процессов и явлений. Им выполнен ряд исследований, оказавших значительное влияние на развитие теории и алгоритмов решения сопряженных уравнений и методов возмущений. В статье Г.И. Марчука и В.В. Орлова "К теории сопряженных функций" [Марчук и др., 1961] был в общем виде сформулирован метод получения сопряженных функций (или функций ценности) для широкого класса неоднородных линейных уравнений и получены формулы теории возмущений для линейных функционалов, которые впоследствии нашли применение при исследовании сложных систем.

На основе метода сопряженных уравнений и теории возмущений Г.И. Марчуком была разработана общая постановка обратных задач, связанных с восстановлением параметров оператора исходной задачи [Марчук, 1964]. С помощью формул малых возмущений Г.И. Марчук предложил алгоритм определения искомого поправки к известным коэффициентам невозмущенной задачи. В результате обратная задача была сведена к задачам линейной алгебры. Было дано развитие теории и на случай, когда невозмущенное состояние значительно отличается от реального. На основе новых постановок обратных задач Г.И. Марчук предложил пути решения проблемы планирования сложного эксперимента, позволяющие среди всевозможных (практически реализуемых) наборов измерений выбрать те, которые оказываются наиболее информативными с точки зрения решения обратной задачи (Марчук, 1964–1982).

Конкретным приложением общих постановок обратных задач с использованием сопряженных уравнений была постановка задач атмосферной оптики, сформулированная в статье Г.И. Марчука “Уравнение для ценности информации с метеорологических спутников и постановка обратных задач” [Марчук, 1964]. Эта статья и другие работы Г.И. Марчука по применению метода статистических испытаний (метод Монте-Карло), выполненные совместно с его учениками, стали основополагающими в атмосферной оптике и теории обратных задач.

Г.И. Марчуком были выполнены важные исследования по теории и приложениям сопряженных уравнений в связи с решением актуальных задач моделирования окружающей среды и оптимизации территориального размещения промышленных объектов (Марчук, 1970–1982). Основу созданной Г.И. Марчуком теории математического моделирования оптимизационных проблем в охране окружающей среды составляет разработанный им математический аппарат сопряженных задач, решения которых являются функциями влияния загрязняющей примеси на окружающую среду. На основе теории сопряженных уравнений Г.И. Марчуком в общем виде решены сложные оптимизационные проблемы размещения промышленных предприятий, при котором соблюдаются нормы на загрязнение экологически значимых зон и учитываются последствия воздействий примесей на биосферу, проблемы оптимальных ограничений на выбросы предприятий, обеспечивающих максимум экономического эффекта. Это сделало реальной постановку задачи по составлению для крупных регионов страны программ по оптимальному в эколого-экономическом смысле размещению и функционированию промышленных предприятий. Основные результаты исследований Г.И. Марчука в этом направлении изложены в монографии “Математическое моделирование в проблеме окружающей среды” [Марчук, 1982].

В последние годы нелинейные задачи становятся объектом широкого фронта исследований. И, естественно, при этом возникают обобщения теории сопряженных уравнений, приспособленные для новых классов задач. Большой интерес здесь вызывают подходы, сформулированные в работах Ямамура (1979), Вайнберга (1968), Маслова (1984), Владимирова, Воловича (1984), Марчука, Агошкова (1988),

Треногина (1996). Разрабатываются новые подходы к построению сопряженных операторов в нелинейных задачах математической физики на основе применения групп преобразований, законов сохранения, общих теорем вариационного исчисления [Марчук, Агошков, Шутяев, 1993; Владимиров и Марчук, 2000; Дымников, 2001].

Особое место в развитии методов теории сопряженных уравнений занимают работы Г.И. Марчука и его учеников в области динамики атмосферы и океана, теории климата. В данной области им создано новое направление исследований, связанное с решением широкого класса задач по оценке чувствительности климатических моделей и четырехмерного усвоения данных натуральных наблюдений в современных моделях гидродинамики океана. Яркой чертой этого направления является сочетание фундаментальных теоретических исследований и натуральных экспериментов, что отразилось в проведении в 1980–1990 гг. крупнейшей в истории развития науки о климате программы исследования климатической изменчивости Земли — научно-наблюдательной программы “Разрезы”. Первоначально теория сопряженных уравнений динамики атмосферы и океана использовалась Г.И. Марчуком для постановки и решения задач апостериорного анализа. Это, например, задача о формировании температурных аномалий в атмосфере и океане, задача о чувствительности изменчивости климата для различных регионов Земли. Подчеркнем, что именно решение сопряженной задачи о чувствительности климата явилось теоретической основой проведения программы “Разрезы”.

С использованием двойственного представления функционала, описывающего среднюю приземную температуру выбранного региона Земли, он записывается в терминах решения сопряженного уравнения. Для сопряженного уравнения ставится задача нахождения подобластей океана, в которых процессы его теплообмена с атмосферой вносят максимальный вклад в значение изучаемого функционала. Сопряженная задача для уравнения конвекции-диффузии тепла решается в обратном времени, данные натуральных наблюдений используются для вычисления скорости атмосферных потоков, океанических течений и коэффициентов турбулентного теплообмена. Вычисленные подоб-

ласти получили название энергоактивных зон океана, и именно в них были сосредоточена наблюдательная часть программы “Разрезы”.

Впоследствии метод сопряженных уравнений получил существенное развитие при решении обратных задач динамики атмосферы и океана и задач четырехмерного вариационного усвоения данных наблюдений. В последние десятилетия в связи с исследованиями глобальных изменений на нашей планете возрастает интерес к проблеме получения и обработки данных измерений с целью ретроспективного анализа в различных областях знаний. Математическая модель данной проблемы может быть сформулирована как задача об усвоении и обработке многомерных (включающих зависимость от временной и пространственных переменных) данных, представляющая собой одну из задач оптимального управления (data assimilation problem). Эта проблема фактически сводится к задаче вычисления распределенных параметров процессов, описываемых эволюционными уравнениями, по результатам наблюдений. Постановки и изучение таких задач на основе теории сопряженных уравнений позволили получить ряд новых результатов в этом направлении.

В последние десятилетия достигнут значительный прогресс в науках о Земле благодаря улучшению систем наблюдений и пониманию закономерностей земной системы. Целью усвоения данных является получение наилучшей в некотором смысле оценки состояния физической системы из ее наблюдений и адекватной математической модели.

Техника усвоения данных широко применяется в науках о Земле. Наибольшие приложения она получила в метеорологии и океанографии, где наблюдения атмосферы и океана ассимилируются в атмосферные и океанские модели с целью получения начальных условий (и других параметров модели). В последние годы методы усвоения данных начинают применяться и для анализа других измерений земной системы, включая биосферу, криосферу и поверхность почвы.

Значительным прогрессом в решении задач усвоения данных было применение вариационных методов, и в частности, методов оптимального управления. Очень плодотворной оказалась идея минимизировать

некоторый функционал, связанный с данными наблюдений, на траекториях (решениях) рассматриваемой модели. Тем самым задача об усвоении данных формулируется как задача оптимального управления. Теоретические основы исследования и решения таких задач заложены в классических работах Р. Беллмана (1957), Л.С. Понтрягина (1962), Н.Н. Красовского (1969), Ж.-Л. Лионса (1968), Г.И. Марчука (1961) и др. Впервые вариационный формализм был использован в метеорологии Сасаки (1958), а в задачах динамической океанографии — Ле Прово и Сальмоном (1986).

При решении задач минимизации возникает необходимость вычислять градиент исходного функционала. Важным шагом в этом направлении было использование теории сопряженных уравнений [Марчук, 1964; Lions, 1968]. Начиная с известных работ [Пененко, 1976; Марчук и Пененко, 1978; Le Dimet and Talagrand, 1986; Lewis, Derber, 1985], применение сопряженных уравнений для исследования и численного решения задач об усвоении данных (в том числе для вычисления градиента функционала) широко практикуется многими исследователями [Marchuk, 1995; Агошков, 2003; Morgensen et al., 2009; Asch et al., 2016; Zalesny et al., 2016; Fletcher, 2017; Carrassi et al., 2018; Shutyaev, 2019; Zalesny et al., 2019; Shutyaev et al., 2022] и др.

В работах Г.И. Марчука и его учеников на базе теории сопряженных уравнений и алгоритмов возмущений исследована разрешимость ряда задач усвоения данных, разработаны и обоснованы итерационные алгоритмы решения этих задач с использованием сопряженных уравнений, проведена оптимизация итерационных процессов на основе спектральных свойств операторов управления, исследована чувствительность функционалов от оптимального решения по отношению к входным данным [Агошков и Марчук, 1993; Марчук и Залесный, 1993; Марчук и Шутяев, 1994; Агошков, 2003; Шутяев, 2001; Шутяев и Пармузин, 2020–2023]. Характерной особенностью современных работ Г.И. Марчука и его учеников является сочетание многокомпонентного метода расщепления и метода сопряженных уравнений [Агошков и др., 2008; Марчук и Залесный, 2012; Agoshkov and Zalesny, 2012; Shutyaev et al., 2022].

Настоящая работа представляет современное состояние исследований школы Г.И. Марчука в области сопряженных уравнений и вариационного усвоения данных наблюдений для модели динамики океана, развиваемой в ИВМ РАН. Разработанная технология четырехмерного вариационного усвоения данных (4D-Var) базируется на методе многокомпонентного расщепления математической модели динамики океана и минимизации функционала стоимости, связанного с данными наблюдений, путем решения системы оптимальности, включающей сопряженные уравнения и ковариационные матрицы ошибок наблюдений и начального приближения. Представлены численные алгоритмы решения вариационных задач усвоения данных на основе современных итерационных процессов со специальным выбором итерационных параметров, а также алгоритмы исследования чувствительности характеристик модели к ошибкам данных наблюдений. Методология иллюстрируется для модели гидротермодинамики Черного моря с вариационным усвоением данных для восстановления тепловых потоков на поверхности моря.

## 1. ВАРИАЦИОННОЕ УСВОЕНИЕ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СОПРЯЖЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

Проиллюстрируем постановку задачи четырехмерного вариационного усвоения данных наблюдений на примере задачи о восстановлении начального условия. Рассмотрим математическую модель некоторого физического процесса, описываемого с помощью эволюционной задачи вида:

$$\frac{d\varphi}{dt} = A(\varphi, t), \quad t \in (0, T), \quad \varphi|_{t=0} = \varphi_0, \quad (1.1)$$

где  $\varphi = \varphi(t)$  — неизвестная функция состояния,  $A$  — оператор модели, и введем функционал от ее решения, связанный с наблюдениями:

$$J(\varphi_0) = \frac{1}{2} \left( C_1 (\varphi_0 - \varphi_0^b), \varphi_0 - \varphi_0^b \right) + \frac{1}{2} \int_0^T \left( C_2 (H\varphi - \psi^0), H\varphi - \psi^0 \right) dt,$$

где  $H$  — (линейный) оператор наблюдений,  $\psi^0$  — функция наблюдений,  $\varphi_0^b$  — заданный вектор,  $C_1, C_2$  — весовые операторы,  $(\cdot, \cdot)$  — скалярное

произведение. Как правило,  $C_1, C_2$  выбираются в виде:  $C_1 = B^{-1}, C_2 = R^{-1}$ , где  $B, R$  — ковариационные матрицы векторов  $\xi = \varphi_0^b - \varphi^t|_{t=0}$  и  $\varepsilon = \psi^0 - H\varphi^t$ , соответственно:  $B = E(\xi\xi^T), R = E(\varepsilon\varepsilon^T)$ . Такие весовые операторы (или их приближения) часто выбираются в практических задачах [Mogensen et al., 2009].

Предположим, что начальное условие  $\varphi_0$  нам неизвестно. Тогда задача об усвоении данных формулируется следующим образом: найти  $\varphi_0, \varphi$  такие, что они удовлетворяют системе (1.1) и на множестве решений функционал  $J$  достигает своего наименьшего значения:

$$\begin{cases} \frac{d\varphi}{dt} = A(\varphi, t), \quad t \in (0, T), \quad \varphi|_{t=0} = \varphi_0, \\ J(\varphi_0) = \inf_v J(v). \end{cases} \quad (1.2)$$

По определению

$$J'(\varphi_0)\delta\varphi_0 = \left( C_1 (\varphi_0 - \varphi_0^b), \delta\varphi_0 \right) + \int_0^T \left( C_2 (H\varphi - \psi^0), H\delta\varphi \right) dt,$$

где  $\delta\varphi$  удовлетворяет линеаризованной системе TLM (tangent linear model):

$$\frac{d\delta\varphi}{dt} = A'(\varphi, t)\delta\varphi, \quad t \in (0, T), \quad \delta\varphi|_{t=0} = \delta\varphi_0. \quad (1.3)$$

Введем сопряженную задачу

$$-\frac{d\varphi^*}{dt} = (A'(\varphi, t))^* \varphi^* + p, \quad \varphi^*|_{t=T} = 0, \quad (1.4)$$

где  $p = H^* C_2 (H\varphi - \psi^0)$ . Тогда из соотношения сопряженности [Марчук, 1992]

$$\int_0^T (p, \delta\varphi) dt = \left( \varphi^*|_{t=0}, \delta\varphi_0 \right)$$

получаем градиент функционала

$$J'(\varphi_0)\delta\varphi_0 = \left( C_1 (\varphi_0 - \varphi_0^b), \delta\varphi_0 \right) + \int_0^T (p, \delta\varphi) dt = \left( C_1 (\varphi_0 - \varphi_0^b) + \varphi^*|_{t=0}, \delta\varphi_0 \right).$$

Необходимое условие оптимальности  $J'(\varphi_0) = 0$  приводит задачу к системе [Lions, 1968] для трех неизвестных  $\varphi_0, \varphi, \varphi^*$ :

$$\frac{d\varphi}{dt} = A(\varphi, t), \quad t \in (0, T), \quad \varphi|_{t=0} = \varphi_0, \quad (1.5)$$

$$-\frac{d\varphi^*}{dt} = (A'(\varphi, t))^* \varphi^* + H^* C_2 (H\varphi - \psi^0), \quad \varphi^*|_{t=T} = 0, \quad (1.6)$$

$$C_1 (\varphi_0 - \varphi_0^b) + \varphi^*|_{t=0} = 0, \quad (1.7)$$

где  $(A'(\varphi, t))^*$  — оператор, сопряженный к производной оператора модели  $A$ . Система (1.5)–(1.7) носит название “системы оптимальности” и играет важную роль для исследования и численного решения задач об усвоении данных.

Эта система может быть получена также из принципа максимума Понтрягина, сформулированного для исходной задачи минимизации [Marchuk and Zalesny, 1993], или методом множителей Лагранжа [Евтушенко и др., 1997].

Разрешимость нелинейных задач об усвоении данных и строгое обоснование численных методов их решения — непростая проблема. Достаточно полные результаты, касающиеся разрешимости линейных задач оптимального управления вида (1.2), (1.5)–(1.7), были получены Ж. Лионсом с использованием разработанного им общего подхода НУМ (Hilbert Uniqueness Method). Дальнейшее развитие этого подхода, а также другие методы исследования задач оптимального управления рассматривались в работах К. Бардоса (1992), Д. Руссела (1973), А.И. Егорова (1978), А.В. Фурсикова (1999), Е. Зуазуа (1990), В.И. Агошкова (1993) и др. Некоторые результаты о разрешимости слабонелинейных задач об усвоении данных были получены в [Agoshkov and Marchuk, 1993; Шутяев, 2001]. Дальнейшие обобщения и новые приложения были предложены в последующие годы [Агошков и др., 2007, 2008].

Для построения численного алгоритма решения задачи об усвоении данных можно использовать известные методы минимизации, либо решать систему оптимальности. При численном решении задачи часто необходимо вычислять градиент исходного функционала  $J$ . Это можно делать с помощью выбранной подходящим образом сопряженной задачи. В нашем примере градиент функционала вычисляется следующим образом: при заданном  $v$  находим последовательно решения прямой и сопряженной задач:

$$\frac{d\varphi}{dt} = A(\varphi, t), \quad t \in (0, T), \quad \varphi|_{t=0} = v, \quad (1.8)$$

$$-\frac{d\varphi^*}{dt} = (A'(\varphi, t))^* \varphi^* + H^* C_2 (H\varphi - \psi^0), \quad \varphi^*|_{t=T} = 0 \quad (1.9)$$

и полагаем

$$J(v) = C_1 (v - \varphi_0^b) + \varphi^*|_{t=0}. \quad (1.10)$$

В работах многих авторов большое внимание уделяется численному построению сопряженной модели (1.9), которая может быть получена как путем дискретизации непрерывной задачи [Sirkes et al., 1997] так и непосредственным транспонированием кода дискретной линеаризованной задачи [Агошков и др., 2008]. В последнем случае зачастую используют методы автоматического дифференцирования [Евтушенко и др., 1997]. Сравнение этих двух подходов к построению дискретной сопряженной задачи проводится, например, в работе [Sirkes et al., 1997].

Алгоритмы четырехмерного вариационного усвоения данных (4D-Var) представляются в настоящее время наиболее эффективными [Дымников, Залесный, 2019; Asch et al., 2016; 2017; Carrassi et al., 2018; Shutyaev, 2019]. В последние годы появилось много работ по сравнению ансамблевого метода Калмана и вариационного усвоения данных [Lorenz, 2003; Fairbairn et al., 2017], кроме того, появился так называемый гибридный подход, сочетающий в себе ансамблевый метод и вариационное усвоение данных [Clayton et al., 2013; Bonavita et al., 2016], а также ансамблевый метод 4D-Var [Desroziers et al., 2014].

Отметим, что технология 4D-Var требует хранения достаточно большого объема данных, так как при решении сопряженной задачи необходимо хранить данные, полученные в ходе решения прямой задачи. Также 4D-Var требует дополнительных вычислительных затрат при решении прямой и сопряженной задачи при усвоении данных и использовании результатов усвоения в модели. Эти недостатки в какой-то мере можно приуменьшить, используя метод расщепления и применяя параллельные алгоритмы решения задач.

## 2. МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ ОКЕАНА И ОСОБЕННОСТИ ЕЕ ЧИСЛЕННОЙ РЕАЛИЗАЦИИ

Применение методологии вариационного усвоения данных мы проиллюстрируем на примере решения задачи усвоения температуры поверхности океана в модели крупномасштабной циркуляции океана, разработанной в ИВМ РАН. Рассмотрим систему уравнений гидротермодинамики в приближении Буссинеска и гидростатики [Agoshkov et al., 2007; Дымников, Залесный, 2019; Zalesny et al., 2020] в области  $D \in R^3$  в виде:

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{d\vec{u}}{dt} + \begin{bmatrix} 0 & -f \\ f & 0 \end{bmatrix} \vec{u} - g \mathbf{grad} \zeta + A_u \vec{u} + \\ & + (A_k)^2 \vec{u} = \vec{F} - \frac{1}{\rho_0} \mathbf{grad} P_a - \\ & - \frac{g}{\rho_0} \mathbf{grad} \int_0^z \rho_1(T, S) dz', \\ & \frac{\partial \zeta}{\partial t} - m \frac{\partial}{\partial x} \left( \int_0^H \Theta(z) u dz \right) - \\ & - m \frac{\partial}{\partial y} \left( \int_0^H \Theta(z) \frac{n}{m} v dz \right) = f_3, \\ & \frac{dT}{dt} + (\vec{U}, \mathbf{Grad}) T + A_T T = \\ & = f_T, \quad \frac{dS}{dt} + (\vec{U}, \mathbf{Grad}) S + A_S S = f_S, \end{aligned} \right. \quad (2.1)$$

где  $(x, y, z) \in D, t \in (0, \bar{t}), \vec{U} = (u, v, w)$  — вектор скорости,  $\vec{u} = (u, v), \zeta$  — функция уровня,  $T$  — температура,  $S$  — соленость,  $\rho_1(T, S) = \rho_0 \beta_T (T - T^{(0)}) + \rho_0 \beta_S (S - S^{(0)}) + \gamma \rho_0 \beta_{TS} (T, S) + f_P, \vec{F} = (f_1, f_2), f_T, f_S, f_P$  — заданные функции “внутренних” источников,  $g = const > 0, \rho_0, T^{(0)}, S^{(0)}$  — “невозмущенные” значения плотности воды, температуры, солености,  $\beta_T, \beta_S$  — коэффициенты,  $\beta_{TS}(T, S), P_a, f_3 \equiv f_3(x, y, \xi, t) \equiv f_3(x, y, t)$  — заданные функции, а  $\gamma$  — числовой параметр. Здесь и в дальнейшем используется следующая весовая функция:  $\Theta(z) \equiv r(z) / R, R$  — радиус Земли,  $n = 1 / r, m = 1 / (r \cos y), H$  — глубина океана (моря). Далее вводится дифференциальный оператор  $A_\varphi \varphi \equiv -\mathbf{Div}(v_\varphi \mathbf{Grad} \varphi)$ , где индекс  $\varphi$  может принимать значения  $u, v, T, S; (A_k)^2$  — оператор четвертого порядка при  $A_\varphi = A_k$ , который определяет-

ся матрицей  $\hat{k} = \text{diag}\{k_{ii}\}$  с неотрицательными диагональными элементами  $k_{ii}$ , являющимися коэффициентами вязкости по соответствующим направлениям.

Граничные условия на поверхности океана  $\Gamma_S = \Omega$  будем задавать следующим образом:

$$\left\{ \begin{aligned} & \left( \int_0^H \Theta \vec{u} dz \right) \vec{n} + \beta_0 m_{op} \sqrt{gH} \xi = m_{op} \sqrt{gH} d_s \text{ на } \partial\Omega, \\ & U_n^{(-)} u - v \frac{\partial u}{\partial z} - k_{33} \frac{\partial}{\partial z} A_k u = \tau_x^{(a)} / \rho_0, \\ & U_n^{(-)} v - v \frac{\partial v}{\partial z} - k_{33} \frac{\partial}{\partial z} A_k v = \tau_y^{(a)} / \rho_0, \\ & A_k u = 0, \quad A_k v = 0, \\ & U_n^{(-)} T - v_T \frac{\partial T}{\partial z} + \gamma_T (T - T_a) = Q_T, \\ & U_n^{(-)} S - v_S \frac{\partial S}{\partial z} + \gamma_S (S - S_a) = Q_S, \end{aligned} \right.$$

где  $\vec{U} = (u, v, w) \equiv (\vec{u}, w), U_n = \vec{U} \cdot \vec{N} = u \cdot N_1 + v \cdot N_2 + w \cdot N_3, \vec{N}$  — единичный вектор внешней нормали на границе,  $U_n^{(-)} = (|U_n| - U_n) / 2, m_{op}$  — характеристическая функция части открытой вертикальной боковой границы,  $\tau_x, \tau_y$  — компоненты векторов касательных напряжений ветра вдоль осей координат,  $\gamma_T, \gamma_S$  — коэффициенты релаксации к заданным значениям температуры и солености соответственно,  $k_{33}$  — коэффициент вертикальной вязкости,  $v$  — коэффициент турбулентного обмена,  $Q_T, Q_S$  — потоки тепла и солености на поверхности. Остальные граничные и начальные условия задаются согласно [Agoshkov et al., 2007; Агошков и др., 2008].

Задача крупномасштабной динамики океана в терминах функций  $u, v, \xi, T, S$  формулируется следующим образом: найти  $u, v, \xi, T, S$ , удовлетворяющие задаче (2.1) при соответствующих граничных и начальных условиях.

Одной из особенностей решения данной задачи является использование метода расщепления [Zalesny et al., 2010; Marchuk, 1990]. Приведем схему расщепления, используемую для аппроксимации исходной математической модели динамики океана и нахождения полного решения задачи  $\varphi = (u, v, \xi, T, S)$ . Введем сетку на интервале  $[0; \bar{t}]$ :  $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{J-1} < t_J = \bar{t}, \Delta t_j = t_j - t_{j-1}$  и рассмотрим систему (2.1) на  $(t_{j-1}, t_j)$ , предполагая, что приближенное реше-

ние  $u_k, v_k, \xi_k, T_k, S_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, j-1$  на предыдущих интервалах уже определено. Применим для аппроксимации получаемой задачи одну из схем метода суммарной аппроксимации, заключающуюся в реализации следующих шагов.

**Шаг 1.** Решается задача для температуры:

$$\begin{aligned} T_t + (\bar{U}, \text{Grad})T - \text{Div}(\hat{a}_T \cdot \text{Grad } T) &= \\ = f_T \quad \text{в } D \times (t_{j-1}, t_j), \\ T &= T_{j-1} \quad \text{при } t = t_{j-1} \quad \text{в } D, \\ \bar{U}_n^{(-)}T - v_T \frac{\partial T}{\partial z} + \gamma_T(T - T_a) &= Q_T \quad \text{на } \Gamma_S \times (t_{j-1}, t_j), \\ \frac{\partial T}{\partial N_T} &= 0 \quad \text{на } \Gamma_{w,c} \times (t_{j-1}, t_j), \\ \bar{U}_n^{(-)}T + \frac{\partial T}{\partial N_T} &= Q_T \quad \text{на } \Gamma_{w,op} \times (t_{j-1}, t_j), \\ \frac{\partial T}{\partial N_T} &= 0 \quad \text{на } \Gamma_H \times (t_{j-1}, t_j). \end{aligned} \quad (2.2)$$

**Шаг 2.** Решается задача для солёности:

$$\begin{aligned} S_t + (\bar{U}, \text{Grad})S - \text{Div}(\hat{a}_S \cdot \text{Grad } S) &= f_S \quad \text{в } D \times (t_{j-1}, t_j), \\ S &= S_{j-1} \quad \text{при } t = t_{j-1} \quad \text{в } D, \\ \bar{U}_n^{(-)}S - v_S \frac{\partial S}{\partial z} + \gamma_S(S - S_a) &= Q_S \quad \text{на } \Gamma_S \times (t_{j-1}, t_j), \\ \frac{\partial S}{\partial N_S} &= 0 \quad \text{на } \Gamma_{w,c} \times (t_{j-1}, t_j), \\ \bar{U}_n^{(-)}S + \frac{\partial S}{\partial N_S} &= Q_S \quad \text{на } \Gamma_{w,op} \times (t_{j-1}, t_j), \\ \frac{\partial S}{\partial N_S} &= 0 \quad \text{на } \Gamma_H \times (t_{j-1}, t_j). \end{aligned} \quad (2.3)$$

**Шаг 3.** Решается подзадача для определения  $u, v, \xi$ :

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{u}}{dt} + \begin{bmatrix} 0 & -f \\ f & 0 \end{bmatrix} \vec{u} - g \text{grad} \xi + A_u \vec{u} + (A_k)^2 \vec{u} &= \\ \vec{f} - \frac{1}{\rho_0} \text{grad} \left( P_a + g \int_0^z \rho_1(\bar{T}, \bar{S}) dz' \right) &\quad \text{в } D \times (t_{j-1}, t_j), \\ \xi_t - \text{div} \left( \int_0^H \Theta \underline{u} dz \right) &= f_3 \quad \text{в } \Omega \times (t_{j-1}, t_j), \\ \vec{u} = \vec{u}_{j-1}, \xi = \xi_{j-1} &\quad \text{при } t = t_{j-1}, \\ \left( \int_0^H \Theta \vec{u} dz \right) \cdot n + \beta_0 m_{op} \sqrt{gH} \xi &= m_{op} \sqrt{gH} d_s \\ \text{на } \partial\Omega \times (t_{j-1}, t_j). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Таким образом, при реализации шагов 1–3 после первого шага получаем приближение к  $T$ , после второго — к  $S$ , а после третьего — приближения к  $\vec{u} = (u, v)$  и  $\xi$ , т.е. подзадачи на этих шагах независимы друг от друга и могут решаться в “параллельном режиме”. Возможно дальнейшее использование подходящих методов расщепления для реализации данного алгоритма, например, как в данной работе, производилось расщепление по трем пространственным координатам. Именно это и было реализовано при получении полной численной модели и в приведенных ниже численных экспериментах.

Отметим, что применение расщепления при построении численных алгоритмов приводит к появлению дополнительных членов в разностной схеме, что вызывает ухудшение аппроксимационных свойств численного алгоритма. При численном расчете следует учитывать возможную потерю устойчивости на промежуточных шагах схемы расщепления из-за возможной потери свойства положительной определенности для составляющих операторов.

### 3. ВАРИАЦИОННОЕ УСВОЕНИЕ ДАННЫХ НАБЛЮДЕНИЙ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОВЕРХНОСТИ ОКЕАНА

Рассмотрим задачу для температуры на первом шаге метода расщепления, предполагая, что  $\bar{U}$  и  $\hat{a}_T$  заданы:

$$\begin{aligned} T_t + (\bar{U}, \text{Grad})T - \text{Div}(\hat{a}_T \cdot \text{Grad } T) &= \\ = f_T \quad \text{в } D \times (t_{j-1}, t_j), \\ T &= T_{j-1} \quad \text{при } t = t_{j-1} \quad \text{в } D, \\ -v_T \frac{\partial T}{\partial z} &= Q \quad \text{на } \Omega \times (t_{j-1}, t_j), \end{aligned} \quad (3.1)$$

где функция полного потока тепла  $Q = -v_T \frac{\partial T}{\partial z}$  на  $\Gamma_S$  предполагается неизвестной.

Введем функционал наблюдений в виде

$$\begin{aligned} J(Q) &= \frac{1}{2} \int_{t_{j-1}\Omega}^{t_j} \int (Q - Q^{(0)}) \mathcal{B}^{-1} (Q - Q^{(0)}) d\Omega dt + \frac{1}{2} J_{0,j}, \\ J_{0,j} &\equiv \int_{t_{j-1}\Omega}^{t_j} \int (T|_{z=0} - T_{obs}) \mathcal{R}^{-1} (T|_{z=0} - T_{obs}) d\Omega dt, \end{aligned} \quad (3.2)$$

где  $Q^{(0)} = Q^{(0)}(x, y, t)$  — заданная функция (начальное приближение для  $Q$ , или бэкграунд),  $T_{obs}$  — функция данных наблюдений температуры на поверхности океана  $\Omega$ , а  $\mathcal{B}$ ,  $\mathcal{R}$  — ковариационные матрицы ошибок начального приближения и данных наблюдений соответственно.

Задача вариационного усвоения данных состоит в отыскании решения (3.1) и функции  $Q$ , таких, что функционал наблюдений (3.2) достигает своего наименьшего значения. Цель вариационного усвоения в данном случае — используя начальное приближение  $Q^{(0)}$ , найти наилучшую оценку для  $Q$ , согласованную с моделью и данными наблюдений, для дальнейшего моделирования и прогноза.

Решение сформулированной задачи вариационного усвоения данных удовлетворяет системе оптимальности, включающей прямую задачу (3.1), сопряженную к ней задачу и условие оптимальности:

$$\mathcal{B}^{-1}(Q - Q^{(0)}) + T^* = 0 \quad \text{на } \Omega \times (t_{j-1}, t_j), \quad (3.3)$$

означающее, что градиент функционала наблюдений  $J(Q)$  по отношению к  $Q$  обращается в нуль. Здесь  $T^*$  — решение сопряженной задачи, которая имеет вид:

$$\begin{aligned} -T^*_{,t} - \text{Div}(\bar{U}T^*) - \text{Div}(\hat{a}_T \cdot \text{Grad } T^*) &= \\ &= 0 \quad \text{в } D \times (t_{j-1}, t_j), \\ T^* &= 0 \quad \text{при } t = t_j, \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$-\nu_T \frac{\partial T^*}{\partial z} = \mathcal{R}^{-1}(T|_{z=0} - T_{obs}) \quad \text{на } \Omega. \quad (3.5)$$

Задача (3.4)–(3.5) является сопряженной по отношению к (3.1) и должна решаться в обратном времени, начиная с  $t = t_j$ . Заметим, что функция данных наблюдений на поверхности океана входит в граничное условие (3.5). Отметим также, что если требуется восстановить начальное условие или другие параметры модели, то в системе оптимальности появятся дополнительные уравнения вида (1.7) и т.п., при этом вид сопряженной задачи не поменяется.

Как показано в [Агошков и др., 2008], система оптимальности, которая определяет решение задачи вариационного усвоения данных, сводится к последовательному решению подзадач для  $t \in (t_{j-1}, t_j)$ ,  $j = 1, 2, \dots, J$ .

Построение приближенного решения полной численной модели с одновременным определением потока тепла  $Q$  путем вариационного усвоения данных наблюдений  $T_{obs}$  можно осуществить с помощью итерационных алгоритмов. Сформулируем один из таких алгоритмов. Если  $Q^{(k)}$  — уже найденное приближение к  $Q$  на  $(t_{j-1}, t_j)$ , то после решения прямой задачи (3.1) при  $Q \equiv Q^{(k)}$  решается сопряженная задача (3.4)–(3.5) и следующее приближение  $Q^{(k+1)}$  вычисляется по формуле:

$$Q^{(k+1)} = Q^{(k)} - \gamma_k (\mathcal{B}^{-1}(Q^{(k)} - Q^{(0)}) + T^*) \quad \text{на } \Omega \times (t_{j-1}, t_j) \quad (3.6)$$

с параметром  $\gamma_k$ , выбранным надлежащим образом, чтобы обеспечить сходимость итерационного процесса [Агошков и др., 2008]. Итерации повторяются до тех пор, пока не будет удовлетворен подходящий критерий сходимости. Такие итерационные алгоритмы исследовались и применялись в работах [Marchuk, 1995; Марчук и Залесный, 2012; Шутяев, 2001].

Сформулированный алгоритм позволяет решить рассматриваемую задачу четырехмерного вариационного усвоения данных. Метод расщепления рассматривается здесь как метод аппроксимации модели, а сама задача вариационного усвоения решается на множестве  $D \times (t_{j-1}, t_j)$ ,  $j = 1, 2, \dots, J$ . Каждый шаг процедуры усвоения согласно (3.1), (3.4)–(3.6) требует решения прямой и сопряженной задач. При использовании  $\sigma$ -системы координат область решения модели не зависит от времени: ее горизонтальные границы не меняются, а вертикальная координата изменяется от нуля до единицы. Это позволяет использовать равномерную сетку в вертикальном направлении, что удобно для численной реализации. Использование метода расщепления по геометрическим координатам позволяет численно решать подзадачи независимо друг от друга.

#### 4. ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ФУНКЦИЙ ОТКЛИКА ПРИ ВАРИАЦИОННОМ УСВОЕНИИ ДАННЫХ

Еще в своих ранних работах Г.И. Марчук формулировал проблему исследования чувствительности решений и функционалов задач математической физики к вариациям параметров

и входных данных. Оказалось, что именно использование сопряженных уравнений позволило исследовать чувствительность функционалов в задачах динамики атмосферы и океана, теории климата, охраны окружающей среды [Marchuk, 1995; Марчук, 1997; Марчук и Пененко, 1979].

При рассмотрении задач вариационного усвоения данных наблюдений важную роль играет анализ чувствительности оптимального решения и его функционалов по отношению к входным данным [Le Dimet et al., 1997; Le Dimet et al., 2002; Le Dimet and Shutyaev, 2005; Daescu, 2008; Gejadze et al., 2008; Gejadze et al., 2010; Chen et al., 2013; Cioaca et al., 2013; Gejadze et al., 2013; Агошков и др., 2013; Шутяев и др., 2019; Gualtieri et al., 2022; Shapiro et al., 2023].

Для понимания и учета неопределенностей в моделях динамики океана важным является исследование чувствительности характеристик модели, полученных после усвоения, к ошибкам данных наблюдений. Морские характеристики представляют интерес в виде функций отклика, зависящих от переменных модели: температуры, солености и др. В настоящем разделе мы изложим развитие идей Г.И. Марчука по использованию аппарата сопряженных уравнений для исследования чувствительности таких функций отклика.

Рассмотрим характеристику модели в форме вещественнозначной функции отклика  $G(T)$ , зависящей от температуры  $T$ . Нас интересует чувствительность  $G(T)$  к данным наблюдений  $T_{obs}$  при условии, что  $T$  получена после вариационного усвоения из системы оптимальности (3.1), (3.3)–(3.5). Как известно, [Marchuk, 1995; Casuci, 1981], чувствительность функции  $G(T)$  определяется градиентом  $G(T)$  по отношению к  $T_{obs}$ :

$$\frac{dG}{dT_{obs}} = \frac{\partial G}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial T_{obs}}. \quad (4.1)$$

Пусть  $\delta T_{obs}$  — вариация функции  $T_{obs}$ , тогда из (3.1), (3.3)–(3.5) получаем систему оптимальности для вариаций  $\delta T, \delta T^*, \delta Q$ :

$$\begin{aligned} \delta T_t + (\bar{U}, \text{Grad}) \delta T - \text{Div}(\hat{a}_T \cdot \text{Grad} \delta T) &= \\ &= 0 \text{ в } D \times (t_{j-1}, t_j), \\ \delta T &= 0 \text{ при } t = t_{j-1}, \\ -v_T \frac{\partial \delta T}{\partial z} &= \delta Q \text{ на } \Omega, \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} -\delta T_t^* - \text{Div}(\bar{U} \delta T^*) - \text{Div}(\hat{a}_T \cdot \text{Grad} \delta T^*) &= \\ &= 0 \text{ в } D \times (t_{j-1}, t_j), \\ \delta T^* &= 0 \text{ при } t = t_j, \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} -v_T \frac{\partial \delta T^*}{\partial z} &= \mathcal{R}^{-1}(\delta T|_{z=0} - \delta T_{obs}) \text{ на } \Omega, \\ \mathcal{B}^{-1} \delta Q + \delta T^* &= 0 \text{ на } \Omega. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Систему (4.2)–(4.4) можно записать в виде задачи вариационного усвоения данных для определения  $\delta T, \delta Q$  по данным наблюдений  $\delta T_{obs}$ . Исключая  $\delta T, \delta T^*$  из системы (4.2)–(4.4), получаем следующее уравнение для вариации  $\delta Q$ :

$$\mathcal{H} \delta Q = \mathcal{C} \delta T_{obs}, \quad (4.5)$$

где  $\mathcal{H}$  — гессиан функционала наблюдений  $J(Q)$  из (3.2), а оператор  $\mathcal{C}$  определен на функциях  $\delta T_{obs}$  по формуле

$$\mathcal{C} \delta T_{obs} = \theta^*, \quad (4.6)$$

где  $\theta^*$  — решение сопряженной задачи

$$\begin{aligned} -\theta_t^* - \text{Div}(\bar{U} \theta^*) - \text{Div}(\hat{a}_T \cdot \text{Grad} \theta^*) &= \\ &= 0 \text{ в } D \times (t_{j-1}, t_j), \\ \theta^* &= 0 \text{ при } t = t_j, \\ -v_T \frac{\partial \theta^*}{\partial z} &= \mathcal{R}^{-1} \delta T_{obs} \text{ на } \Omega. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Из (4.5) получаем

$$\delta Q = \mathcal{H}^{-1} \mathcal{C} \delta T_{obs}. \quad (4.8)$$

Формула (4.8) дает точное выражение для вариации оптимального решения  $\delta Q$  через вариации (ошибки) данных наблюдений  $\delta T_{obs}$ . Эта формула может быть использована для исследования чувствительности функции отклика к ошибкам данных наблюдений.

Рассмотрим значение градиента (4.1) на вариации  $\delta T_{obs}$ :

$$\left( \frac{dG}{dT_{obs}}, \delta T_{obs} \right) = \left( \frac{\partial G}{\partial T}, \delta T \right), \quad (4.9)$$

где  $(\cdot, \cdot)$  обозначает скалярное произведение. Следуя подходу Г.И. Марчука, введем сопряженную задачу

$$\begin{aligned} -\phi_t^* - \text{Div}(\bar{U} \phi^*) - \text{Div}(\hat{a}_T \cdot \text{Grad} \phi^*) &= \\ &= \frac{\partial G}{\partial T} \text{ в } D \times (t_{j-1}, t_j), \\ \phi^* &= 0 \text{ при } t = t_j. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Тогда, используя соотношение сопряженности между (4.2) и (4.10), получаем для (4.9):

$$\left( \frac{dG}{dT_{obs}}, \delta T_{obs} \right) = \left( \frac{\partial G}{\partial T}, \delta T \right) = (\mathcal{F}, \delta Q), \quad (4.11)$$

where  $F = \phi^*|_{z=0}$ , где  $\phi^*$  — решение сопряженной задачи (4.10).

Из (4.8)–(4.11) следует, что

$$\left( \frac{dG}{dT_{obs}}, \delta T_{obs} \right) = (\mathcal{F}, \mathcal{H}^{-1} \mathcal{C} \delta T_{obs}) = (\mathcal{C}^* \mathcal{H}^{-1} \mathcal{F}, \delta T_{obs}), \quad (4.12)$$

где  $\mathcal{C}^*$  — оператор, сопряженный к  $\mathcal{C}$ . Следовательно, градиент функции отклика  $G(T)$  по отношению к  $T_{obs}$  определяется по формуле

$$\frac{dG}{dT_{obs}} = \mathcal{C}^* \mathcal{H}^{-1} \mathcal{F}, \quad (4.13)$$

которая позволяет исследовать чувствительность функции  $G$ .

Для численной реализации алгоритма вычисления градиента функции отклика согласно формуле (4.13) необходимо выполнить следующие шаги:

- 1) решить сопряженную задачу (4.10) и положить  $\mathcal{F} = \phi^*|_{z=0}$ ,
- 2) решить уравнение  $\mathcal{H} \delta Q = \mathcal{F}$ ,
- 3) решить прямую задачу (4.2),
- 4) вычислить градиент функции отклика по формуле:

$$\frac{dG}{dT_{obs}} = R^{-1} \delta T|_{z=0}. \quad (4.14)$$

Вычисляя производную  $\frac{\partial G}{\partial T}$  для конкретной задачи, этот алгоритм можно использовать для исследования чувствительности функции отклика, связанной с температурой, полученной в результате вариационного усвоения данных наблюдений.

Аналогичные алгоритмы с использованием сопряженных уравнений можно сформулировать для исследования чувствительности функций отклика, полученных в результате вариационного усвоения данных наблюдений, по отношению к другим параметрам и входным данным задачи.

## 5. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ДЛЯ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ ЧЕРНОГО МОРЯ

Для численных экспериментов использовалась трехмерная численная модель гидротермодинамики Черного моря, разработанная в ИВМ РАН на основе метода расщепления [Zalesny et al., 2012] и дополненная процедурой усвоения температуры поверхности моря (ТПМ) для восстановления тепловых потоков  $Q$  с учетом ковариационных матриц ошибок наблюдений и ошибок данных о потоке тепла.

Параметры рассматриваемой области Черного моря и ее географические координаты можно описать следующим образом:  $\sigma$ -сетка  $306 \times 200 \times 27$  (широта, долгота и глубина соответственно). Первая точка “сетки С” [Дианский и др., 2002] имеет координаты  $26.65^\circ E$  и  $40.15^\circ N$ . 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. На рис. 1 представлена расчетная область с топографией Черного моря.

В качестве данных наблюдений  $T_{obs}$  в данном эксперименте были выбраны данные ТПМ спектрометра MODIS на спутнике Terra, предоставленные спутниковой службой ‘See the Sea’, входящей в состав ЦКП “ИКИ Мониторинг” [Лупян и др., 2012]. Данные ТПМ были пересчитаны на сетку численной модели [Захарова, 2016].

Значения среднего климатического теплового потока  $Q^{(0)}$  использовались в процедуре усвоения данных в качестве начального приближения (бэкграунда). Поток тепла на поверхности моря рассчитан по данным реанализа Era 5 за период с 1979 по 2021 г. [Hersbach et al., 2020]. По

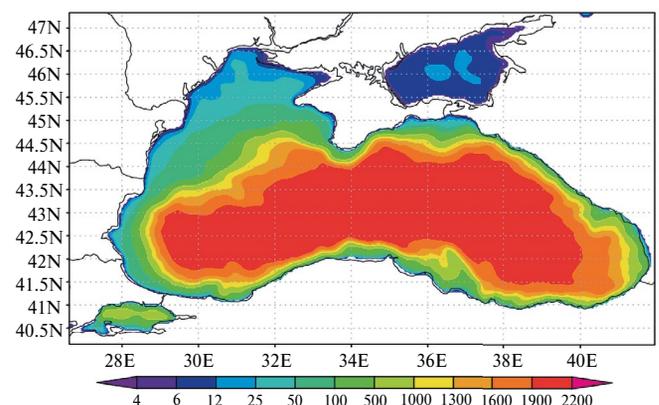


Рис. 1. Расчетная область и топография Черного моря (м)

данным за 1979–2021 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  $B$  ошибок бэкграунда. Аналогичным образом [Агошков и др., 2019] на основе данных ТПМ сервиса Copernicus (data.marine.copernicus.eu) за период с 1982 по 2019 г. рассчитывались элементы ковариационной матрицы ошибок данных наблюдений  $R$ .

Численные эксперименты были проведены для модели Черного и Азовского морей с усвоением температуры поверхности  $T_{obs}$ . Алгоритм усвоения работал лишь в некоторые моменты времени  $t_k$ , при этом  $\bar{t} = t_{k+1} = t_k + \Delta t$ . При реализации процедуры усвоения на одном шаге по времени  $(t_k, t_{k+1})$  рассматривалась система вида (3.1), (3.3)–(3.5) с диагональными ковариационными матрицами  $B$  и  $R$ . Кроме того, на каждом из таких шагов был проведен расчет чувствительности функции отклика  $G(T)$  к ошибкам данным наблюдений согласно алгоритму из раздела 4.

На рис. 2 представлены диагональные элементы матриц  $B$  (рис. 2а) и  $R$  (рис. 2б), используемые в эксперименте. На рис. 3а приведены данные наблюдений, полученные со спутника Тегга, на 12 апреля 2020 г. 23 ч 30 мин. Заметим, что пробелы на графике показывают области акватории с отсутствием данных.

Пример рассчитанного потока тепла на 12 апреля 2020 г. приведен на рис. 3б.

На рис. 4 представлены среднесуточные значения температуры поверхности моря на 12 апреля 2020 г. по результатам расчета по модели без блока усвоения (рис. 4а), с использованием блока усвоения данных (рис. 4б) и среднесуточные данные наблюдений за этот день (рис. 4с). Согласно проведенным расчетам, модель без усвоения несколько занижает температуру поверхности моря в западной и северо-западной частях Черного моря, где разность между данными наблюдений и расчетами по модели может достигать  $2.5\text{--}3\text{ }^\circ\text{C}$ , а также на большей части Азовского моря, где разность достигает  $1\text{--}2\text{ }^\circ\text{C}$ . Введение блока усвоения данных улучшает прогностические свойства модели, т.е. позволяет получить поле температуры значительно ближе к данным наблюдений в смысле наименьших

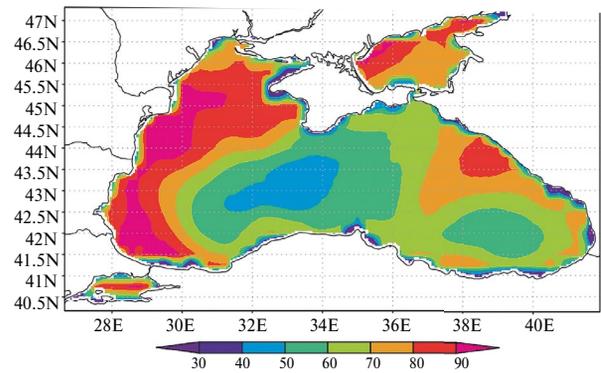
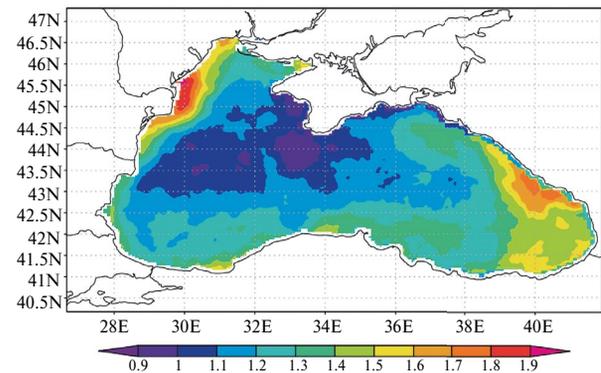
(а) Диагональные элементы матрицы  $B$ (б) Диагональные элементы матрицы  $R$ 

Рис. 2. Значения диагональных элементов матриц  $B$  и  $R$  в численном эксперименте

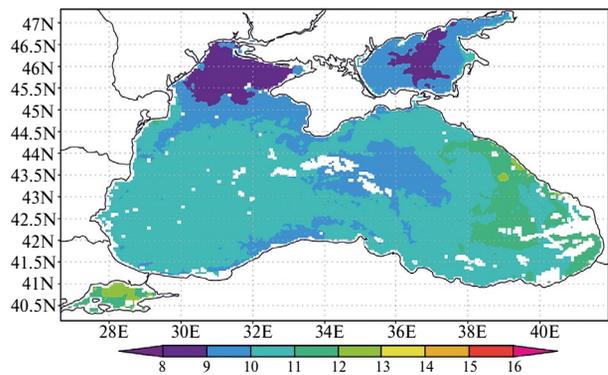
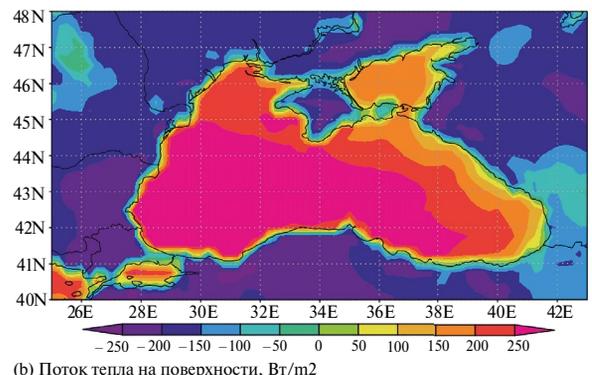
(а) Температура поверхности моря, спутник Тегга, 23 часа 30 мин,  $^\circ\text{C}$ (б) Поток тепла на поверхности, Вт/м<sup>2</sup>

Рис. 3. Данные, используемые при расчетах на 12 апреля 2020 г.

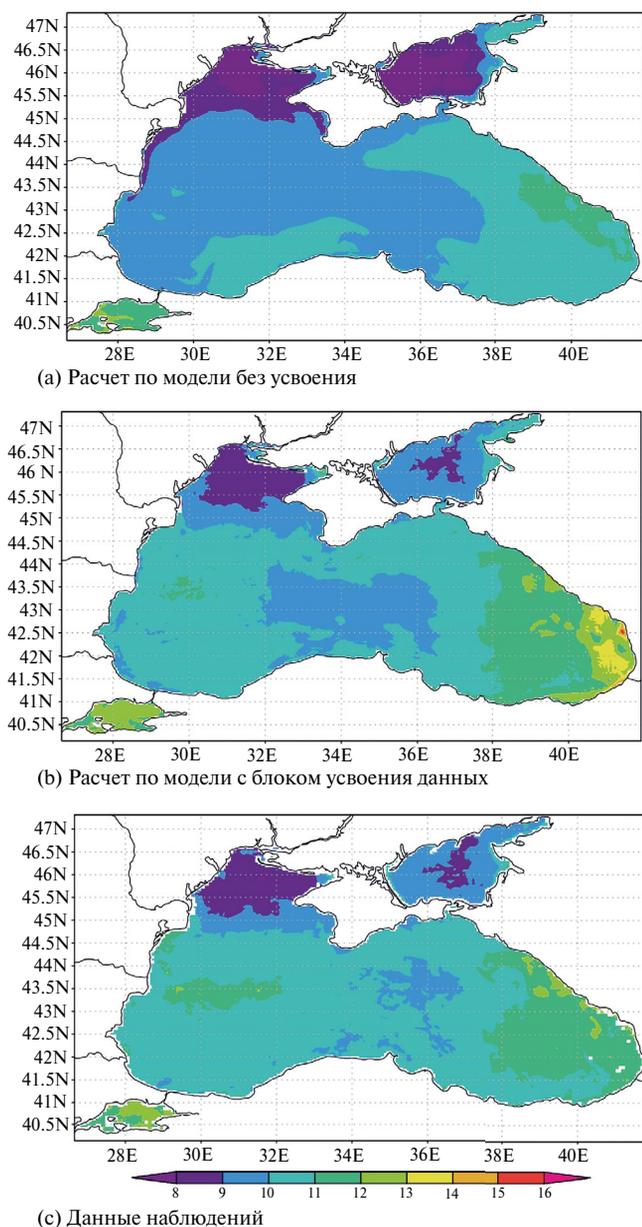


Рис. 4. Среднесуточная температура поверхности моря на 12 апреля 2020 г., °С

квадратов (3.2). Так, в западной и северо-западной частях Черного моря удастся уменьшить отклонение от данных наблюдений до  $1^\circ\text{C}$ , а в Азовском море до  $0.5^\circ\text{C}$ .

Представленный в разделе 4 алгоритм позволяет определять области наибольшего градиента функции отклика как средней по интервалу температуры поверхности океана для избранного района, полученной в результате процедуры усвоения. В численных расчетах рассматривалась функция отклика вида

$$G(T) = \frac{1}{\tau} \int_{t_1-\tau}^{t_1} dt \left( \frac{1}{\text{mes } \omega} \int_{\omega} T(x, y, 0, t) d\Omega \right), \quad (5.1)$$

которая определяет среднюю температуру в избранной акватории моря  $\omega$  при  $z = 0$  в интервале  $t_1 - \tau \leq t \leq t_1$ , где  $\text{mes } \omega$  означает площадь района  $\omega$ .

Результаты расчета градиента функции отклика  $G(T)$  по отношению к ошибкам данным наблюдений согласно алгоритму для 12 апреля 2020 г. приведены на рис. 5. Из рисунка видно, что наиболее мелкие северо-западная и западная части Черного моря наиболее чувствительны к этим ошибкам с максимальным значением градиента  $5.0 \times 10^{-3}$ . Эти результаты подтверждаются прямыми вычислениями функции отклика  $G(T)$ , полученной после вариационного усвоения, путем введения возмущений в данные наблюдений  $T_{obs}$ , следуя работе [Le Dimet et al., 2016].

Использование данной технологии четырехмерного вариационного усвоения данных (4D-Var) улучшает прогностические свойства модели, а предложенный алгоритм позволяет оценивать чувствительность функций отклика, связанных с температурой поверхности моря после вариационного усвоения, по отношению к ошибкам данных наблюдений в случае, когда значения этих ошибок заранее не известны.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлено современное состояние исследований в области вариационного усвоения данных наблюдений с использованием сопряженных уравнений, развиваемых Г.И. Марчуком и его научной школой на протяжении многих

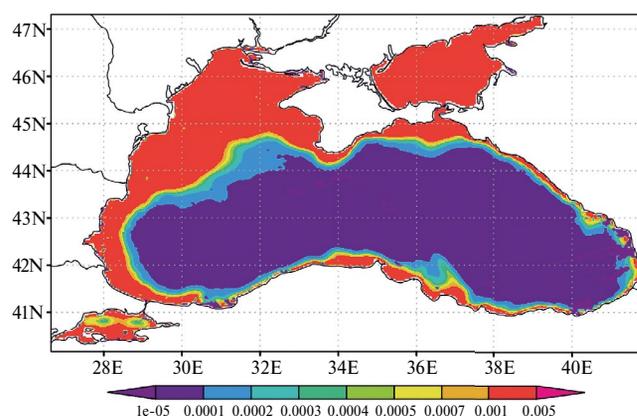


Рис. 5. Градиент функции отклика  $G(T)$

лет. Разработанная технология четырехмерного вариационного усвоения данных (4D-Var) базируется на методе многокомпонентного расщепления математической модели динамики океана и минимизации функционала стоимости, описывающего отклонение решения от данных наблюдений. Задача сводится к решению системы оптимальности, включающей прямые и сопряженные уравнения, а также ковариационные матрицы ошибок наблюдений и начального приближения. Представлены эффективные алгоритмы решения вариационных задач усвоения данных на основе современных итерационных процессов со специальным выбором итерационных параметров. Методология проиллюстрирована для модели гидротермодинамики Черного моря с вариационным усвоением ТПМ для восстановления тепловых потоков на поверхности моря. Численные эксперименты подтверждают эффективность предложенных алгоритмов.

На основе развития и обобщения идей Г.И. Марчука представлена методология исследования чувствительности морских характеристик как функций отклика от решения задачи вариационного усвоения к ошибкам данных наблюдений для модели динамики океана. Разработанные алгоритмы позволяют вычислять градиенты функций отклика, полученных в ходе усвоения, по отношению к данным наблюдений о температуре поверхности моря. Для вычисления градиента решаются прямая и сопряженная задачи, а также уравнения с гессианом функции стоимости. С помощью разработанных алгоритмов можно определять области наибольшего градиента функции отклика (например, средней по интервалу температуры поверхности океана) для избранного района, полученной в результате процедуры усвоения.

Численные эксперименты для модели динамики Черного моря подтвердили эффективность представленной вычислительной 4D-технологии вариационного усвоения с анализом чувствительности и продемонстрировали, что усвоение данных может улучшить прогностические свойства модели. Методология оценки градиентов функций отклика может быть использована в проблеме оптимального размещения сенсоров и станций наблюдений для решения практических задач вариационного усвоения

данных, важных для мониторинга состояния морской среды и климата.

## ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда: проект 20-11-20057 (исследования в разделах 1–4) и проект 19-71-20035 (исследования в разделе 5).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Агошков В.И.* Методы оптимального управления и сопряженных уравнений в задачах математической физики. М.: ИВМ РАН, 2003, 256 с.
- Агошков В.И., Ипатов В.М.* Разрешимость задачи усвоения данных наблюдений в трехмерной модели динамики океана // Дифференциальные уравнения. 2007. Т. 43. № 8. С. 1064–1075.
- 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.
- 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 гидрофизический журнал. 2019. Т. 35. № 6. С. 585–599.
- Владимиров В.С., Марчук Г.И.* Об определении сопряженного оператора для нелинейных задач // Докл. АН СССР. 2000. Т. 372. № 2. С. 165–168.
- Дианский Н.А., Багно А.В., Залесный В.Б.* Сигма-модель глобальной циркуляции океана и ее чувствительность к вариациям напряжения трения ветра // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2002. Т. 38. № 4. С. 537–556.
- Дымников В.П.* Сопряженные уравнения систем гидродинамического типа // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2001. Т. 37. № 4. С. 3–9.
- Дымников В.П., Залесный В.Б.* Основы вычислительной геофизической гидродинамики. М.: ГЕОС, 2019. 448 с.
- Захарова Н.Б.* Верификация данных наблюдений о температуре поверхности моря // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2016. Т. 13. № 3. С. 106–113.
- Луян 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 // Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2012. Т. 9. № 2. С. 251–261.

- Марчук Г.И.* О постановке некоторых обратных задач // ДАН СССР. 1964. Т. 156. № 3. С. 503–506.
- Марчук Г.И.* Уравнение для ценности информации с метеорологических спутников и постановка обратных задач // Космич. исслед. 1964. Т. 2. Вып. 3. С. 462–477.
- Марчук Г.И.* Основные и сопряженные уравнения динамики атмосферы и океана // Метеорология и гидрология. 1974. № 2. С. 9–37.
- Марчук Г.И.* Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. М.: Наука, 1982. 320 с.
- Марчук Г.И.* Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. М.: Наука, 1992. 334 с.
- Марчук Г.И.* Сопряженные уравнения и чувствительность функционалов // Исследование Земли из космоса. 1997. № 4. С. 100–125.
- Марчук Г.И., Агошков В.И., Шутяев В.П.* Сопряженные уравнения и методы возмущений в нелинейных задачах математической физики. М.: Наука, 1993. 224 с.
- Марчук Г.И., Орлов В.В.* К теории сопряженных функций. Нейтронная физика. М.: Госатомиздат, 1961. С. 30–45.
- Марчук Г.И., Пененко В.В.* Исследование чувствительности дискретных моделей динамики атмосферы и океана // Изв. АН СССР. Физика атмосферы и океана. 1979. Т. 15. № 11. С. 1123–1131.
- Пененко В.В.* Методы численного моделирования атмосферных процессов. Л.: Гидрометеоздат, 1981. 352 с.
- Пененко В.В., Образцов Н.Н.* Вариационный метод согласования полей метеорологических элементов // Метеорология и гидрология. 1976. № 11. С. 1–11.
- Шутяев В. П.* Операторы управления и итерационные алгоритмы в задачах вариационного усвоения данных. М.: Наука, 2001. 239 с.
- Шутяев В.П.* Методы усвоения данных наблюдений в задачах физики атмосферы и океана // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана. 2019. Т. 55. № 1. С. 17–34.
- Шутяев В.П., Ле Диме Ф.* Чувствительность функционалов задач вариационного усвоения данных // Доклады академии наук. Математика. 2019. Т. 486. № 4. С. 421–425.
- 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. Model. 2007. V. 22. P. 133–161.
- Agoshkov V.I., Marchuk G.I.* On solvability and numerical solution of data assimilation problems // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 1993. V. 8. P. 1–16.
- Asch M., Bocquet M., Nodet M.* Data Assimilation: Methods, Algorithms, and Applications; SIAM: Philadelphia, USA, 2016.
- Cacuci D.G.* Sensitivity theory for nonlinear systems: II. Extensions to additional classes of responses // J. Math. Phys. 1981. V. 22. P. 2803–2812.
- Carrassi A., Bocquet M., Bertino L., Evensen G.* Data assimilation in the geosciences: an overview of methods, issues, and perspectives // WIREs Clim. Change. 2018. V. 9. P. 1–80.
- Chen F., Shapiro G., Thain R.* Sensitivity of Sea Surface Temperature Simulation by an Ocean Model to the Resolution of the Meteorological Forcing // Int. Sch. Res. Not. Oceanography. 2013. V. 2013. P. 215715.
- Cioaca A., Sandu A., de Sturler E.* Efficient methods for computing observation impact in 4D-Var data assimilation // Comput. Geosci. 2013. V. 17. P. 975–990.
- Clayton A. M., Lorenc A. C., Barker D. M.* Operational implementation of a hybrid ensemble/4D-Var global data assimilation at the Met Office // Q. J. Roy. Meteor. Soc. 2013. V. 139. P. 1445–1461.
- Sirkes Z., Tziperman E.* Finite difference of adjoint or adjoint of finite difference? // Mon. Weather Rev. 1997. V. 125. P. 3373–3378.
- Daescu D.N.* On the sensitivity equations of four-dimensional variational (4D-Var) data assimilation // Mon. Weather Rev. 2008. V. 136. P. 3050–3065.
- Le Dimet F.X., Talagrand O.* Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations: theoretical aspects // Tellus. 1986. V. 38A. P. 97–110.
- Fletcher, S.J.* Data Assimilation for the Geosciences: From Theory to Application; Elsevier: Amsterdam, the Netherlands, 2017.
- Gejadze I., Le Dimet F.-X., Shutyaev V.P.* On analysis error covariances in variational data assimilation // SIAM J. Sci. Comput. 2008. V. 30. № 4. P. 1847–1874.
- 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.
- 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.
- Gualtieri G.* Analysing the uncertainties of reanalysis data used for wind resource assessment: A critical review // Renew. Sustain. Energy Rev. 2022. V. 167. P. 112741.
- Hersbach H. et al.* The ERA5 global reanalysis // Q. J. R. Meteorol. Soc. 2020. V. 146. P. 1999–2049.
- 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.

- 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.
- Le Dimet F.-X., Shutyaev V.* On deterministic error analysis in variational data assimilation // *Nonlinear Processes in Geophysics*. 2005. V. 12. P. 481–490.
- Le Dimet F.-X., Shutyaev V., Parmuzin E.* Sensitivity of functionals with respect to observations in variational data assimilation // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*. 2016. V. 31. № 2. P. 81–91.
- Lions J.L.* Contrôle optimal des systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles. Paris: Dunod, 1968.
- Marchuk G.I.* Adjoint Equations and Analysis of Complex Systems. Dordrecht: Kluwer, 1995.
- Marchuk G.I.* Splitting and alternating direction methods / *Handbook of Numerical Analysis*. V. 1. Ed. Ciarlet P.G., Lions J.L., North-Holland: Amsterdam, 1990. P. 197–462.
- Marchuk G.I., Zalesny V.B.* A numerical technique for geophysical data assimilation problem using Pontryagin's principle and splitting-up method // *Russian J. Numer. Anal. Math. Mod.* 1993. V. 8. No. 4. P. 311–326.
- 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.
- Sasaki Y.K.* An objective analysis based on the variational method // *J. Meteor. Soc. Japan*. 1958. V. 36. P. 77–88.
- Shapiro G.I., Salim M.* How efficient is model-to-model data assimilation at mitigating atmospheric forcing errors in a regional ocean model? // *J. Mar. Sci. Eng.* 2023. V. 11. № 5. P. 935.
- Shutyaev V.P., Agoshkov V.I., Parmuzin E.I., Zalesny V.B., Zakharova N.B.* 4D technology of variational data assimilation for sea dynamics problems // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2022. V. 9. No. 1. P. 4–16.
- Zalesny V.B., Agoshkov V.I., Shutyaev V.P., Le Dimet F., Ivchenko B.O.* Numerical modeling of ocean hydrodynamics with variational assimilation of observational data // *Izv. Atmos. Ocean. Phys.* 2016. V. 52. P. 431–442.
- Zalesny V., Agoshkov V., Shutyaev V., Parmuzin E., Zakharova N.* Numerical modeling of marine circulation with 4D variational data assimilation // *J. Mar. Sci. Eng.* 2020. V. 8 No. 503. P. 1–19.
- 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. Modelling*. 2012. V. 27. № 1. P. 95–112.
- Zalesny V.B., Marchuk G.I., Agoshkov V.I., Bagno A.V., Gusev A.V., Diansky N.A., Moshonkin S.N., Tamsalu R., Volodin E.M.* Numerical simulation of large-scale ocean circulation based on the multicomponent splitting method // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Model.* 2010. V. 25. P. 581–609.

## ADJOINT EQUATIONS AND METHODS OF VARIATIONAL DATA ASSIMILATION IN PROBLEMS OF GEOPHYSICAL HYDRODYNAMICS

© 2025 V. I. Agoshkov, V. B. Zalesny, V. P. Shutyaev\*, E. I. Parmuzin, N. B. Zakharova

*Marchuk Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences, Gubkina str., 8, Moscow, 119333 Russia*

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

The current state of research in the field of adjoint equations and variational assimilation of observational data for the ocean dynamics model developed at the Institute of Numerical Mathematics of the Russian Academy of Sciences is presented. The developed technology of four-dimensional variational data assimilation (4D-Var) is based on the method of multicomponent splitting of the mathematical model of ocean dynamics and minimization of the cost functional associated with observational data by solving an optimality system including adjoint equations and covariance matrices of observational errors and the background errors. Efficient algorithms for solving variational data assimilation problems based on modern iterative processes with a special choice of iterative parameters, as well as algorithms for studying the sensitivity of model characteristics to observational data errors are proposed. The methodology is illustrated for the Black Sea hydrothermodynamics model with variational data assimilation for reconstructing heat fluxes on the sea surface.

**Keywords:** adjoint equations, optimal control, variational data assimilation, sensitivity, sea hydrothermodynamics model