

PROBLÈMES INVERSES POUR L'ENVIRONNEMENT

DIDIER AUROUX

AUROUX@UNICE.FR
M2 MATHÉMATIQUES
UNIVERSITÉ DE NICE SOPHIA ANTIPOLIS
2010-2011

TABLE DES MATIÈRES

1. Problèmes inverses, problèmes mal posés	3
1.1. Introduction aux problèmes inverses	3
1.2. Exemple de problème inverse	3
1.3. Problème bien posé - mal posé	4
1.4. Exemple de problème inverse mal posé	4
1.5. Exemple de problème inverse mal posé - 2	5
2. Assimilation de données	6
2.1. Introduction	6
2.2. Spécificités en géophysique	6
2.3. Analyse	6
2.4. Estimation de paramètres : vecteur d'état, contrôle, et observations	7
3. Moindres carrés	9
3.1. Notations et hypothèses	9
3.2. Moindres carrés	9
3.3. Remarques	11
3.4. Un exemple simple	11
4. 3D-VAR et interpolation optimale	13
4.1. Interpolation optimale	13
4.2. 3D-VAR	13
4.3. Information contenue dans la Hessienne	14
5. Méthodes variationnelles : contrôle optimal, état adjoint	15
5.1. 4D-VAR : assimilation variationnelle en dimension 4	15
5.2. Modèle adjoint et minimisation	16
5.3. Lagrangien et système d'optimalité	17
5.4. Estimation de paramètres	19
5.5. Préconditionnement	21
5.6. Méthode incrémentale	21
6. Méthodes séquentielles : filtre de Kalman	23
6.1. Notations et hypothèses	23
6.2. Filtre de Kalman	23
6.3. Équivalence avec le 4D-VAR	24
6.4. Filtre de Kalman étendu	24
6.5. Commentaires	24

7.	Estimation de paramètres dans un système d'EDO	25
7.1.	Cas linéaire	25
7.2.	Cas général	27
7.3.	Algorithme numérique de résolution du problème d'identification	28
8.	Application à un système météo/océano simple	31
8.1.	Équation de Burgers	31
8.2.	Équations de Saint-Venant	32

1. PROBLÈMES INVERSES, PROBLÈMES MAL POSÉS

1.1. Introduction aux problèmes inverses. Un problème inverse est une situation dans laquelle les valeurs de certains paramètres (ou inconnues) d'un modèle doivent être identifiées à partir d'observations (ou mesures) du phénomène. C'est également en quelques sortes le contraire d'un problème direct : supposons que l'on dispose d'un modèle. Si on se fixe des valeurs pour les paramètres du modèle, on peut alors faire tourner le modèle, en déduire une trajectoire, et l'observer. Il s'agit du problème direct. Le problème inverse consiste à remonter le schéma : connaissant les observations, le but est de retrouver les valeurs des paramètres.

La résolution du problème inverse passe donc en général par une étape initiale de modélisation du phénomène, dite problème direct qui décrit comment les paramètres du modèle se traduisent en effets observables expérimentalement. Ensuite, à partir des mesures obtenues sur le phénomène réel, la démarche va consister à approximer au mieux les paramètres qui permettent de rendre compte de ces mesures. Cette résolution peut se faire par simulation numérique ou de façon analytique. La résolution mathématique est rendue difficile par le fait que les problèmes inverses sont en général des problèmes mal posés, c'est-à-dire que les seules observations expérimentales ne suffisent pas à déterminer parfaitement tous les paramètres du modèle. Il est donc nécessaire d'ajouter des contraintes ou des a priori qui permettent de réduire l'espace des possibilités de façon à aboutir à une solution unique.

On retrouve des problèmes inverses dans de nombreux domaines scientifiques, en particulier dans l'étude de systèmes complexes pour lesquels on a accès qu'à un petit nombre de mesures, par exemple : la Terre en géophysique, les tissus organiques en imagerie médicale, l'Univers en cosmologie, une salle de concert en acoustique architecturale ...

Exemples : résolution d'un système linéaire, ingénierie pétrolière, tomographie en médecine, déconvolution (en imagerie notamment), détermination des constantes d'une réaction chimique, détermination de la forme d'un obstacle par radar, acoustique sous-marine, ...

1.2. Exemple de problème inverse. On s'intéresse à l'estimation de paramètres dans une équation aux dérivées partielles :

$$(1) \quad \begin{cases} \frac{\partial y}{\partial t} - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \left(a \frac{\partial y}{\partial x_i} \right) = f & \text{dans } \Omega \times]0; T[, \\ y(x, 0) = y_0(x) & \text{dans } \Omega, \\ \frac{\partial y}{\partial n} = g & \text{sur } \Gamma \times]0; T[. \end{cases}$$

C'est l'équation de la chaleur, y est la température, f est un terme source, a est la conductivité thermique, et g est le flux de chaleur (entrant ou sortant). On peut utiliser la même équation pour modéliser un écoulement monophasique (comme du pétrole) : y est la pression, f représente les puits de pompage, a est la perméabilité du milieu, et $g = 0$ pour un milieu fermé.

Le problème est le suivant : à partir de mesures de y en certains points et à certains instants, il faut identifier a . Le problème direct est évidemment trivial, mais le problème inverse peut être des plus compliqués.

1.3. Problème bien posé - mal posé. Un problème bien posé, au sens de Hadamard, a les propriétés suivantes : une solution existe, la solution est unique, et elle dépend de façon continue des données.

Le problème est mal posé si l'une de ces propriétés n'est pas satisfaite. En pratique, les problèmes inverses ne vérifient souvent pas l'une ou l'autre de ces conditions.

Un modèle physique étant fixé, les données expérimentales dont on dispose sont en général bruitées, et rien ne garantit que de telles données proviennent de ce modèle, même pour un autre jeu de paramètres.

Si une solution existe, il est parfaitement concevable (et nous le verrons sur des exemples) que des paramètres différents conduisent aux mêmes observations.

Le fait que la solution d'un problème inverse puisse ne pas exister n'est pas une difficulté sérieuse. Il est habituellement possible de rétablir l'existence en relaxant la notion de solution (procédé classique en mathématique).

La non-unicité est un problème plus sérieux. Si un problème a plusieurs solutions, il faut un moyen de choisir entre elles. Pour cela, il faut disposer d'informations supplémentaires (une information a priori).

Le manque de continuité est sans doute le plus problématique, en particulier en vue d'une résolution approchée ou numérique. Cela veut dire qu'il ne sera pas possible (indépendamment de la méthode numérique) d'approcher de façon satisfaisante la solution du problème inverse, puisque les données disponibles seront bruitées donc proches, mais différentes, des données réelles.

Exemple : système linéaire mal posé, problème de Cauchy pour une équation elliptique, déconvolution.

1.4. Exemple de problème inverse mal posé. La différentiation est l'intégration sont deux problèmes inverses l'un de l'autre. Il est plus habituel de penser à la différentiation comme problème direct, et à l'intégration comme problème inverse. En fait, l'intégration possède de bonnes propriétés mathématiques qui conduisent à le considérer comme le problème direct. Et la différentiation est le prototype du problème mal posé, comme nous allons le voir.

Considérons l'espace de Hilbert $L^2(\Omega)$, et l'opérateur intégral A défini par

$$(2) \quad Af(x) = \int_0^x f(t) dt.$$

Il est facile de voir directement que A est un opérateur linéaire de $L^2(0;1)$. Cet opérateur est injectif, par contre son image est le sous espace vectoriel

$$Im(A) = \{f \in H^1(0;1), u(0) = 0\},$$

où $H^1(0;1)$ est l'espace de Sobolev. En effet, l'équation $Af = g$ est équivalente à $f(x) = g'(x)$ et $g(0) = 0$. L'image de A n'est pas fermée dans $L^2(0;1)$ (bien entendu, elle l'est dans $H^1(0;1)$). En conséquence, l'inverse de A n'est pas continu sur $L^2(0;1)$, comme le montre l'exemple suivant.

Considérons une fonction $g \in C^1([0;1])$, et $n \in \mathbb{N}$. Soit

$$g_n(x) = g(x) + \frac{1}{n} \sin(n^2 x).$$

Alors

$$f_n(x) = g'_n(x) = g'(x) + n \cos(n^2 x) = f'(x) + n \cos(n^2 x).$$

De simples calculs montrent que $\|g - g_n\|_2 = \mathcal{O}(1/n)$ alors que $\|f - f_n\|_2 = \mathcal{O}(n)$.

Ainsi, la différence entre f et f_n peut-être arbitrairement grande, alors même que la différence entre g et g_n est arbitrairement petite. L'opérateur de dérivation (l'inverse de A) n'est donc pas continu, au moins avec ce choix des normes.

L'instabilité de l'inverse est typique des problèmes mal posés. Une petite perturbation sur les données (ici g) peut avoir une influence arbitrairement grande sur le résultat (ici f). Une seconde classe de problèmes inverses est l'estimation de paramètres dans les équations différentielles. Nous allons en voir un exemple très simple.

1.5. Exemple de problème inverse mal posé - 2. On considère le problème elliptique en dimension 1 :

$$(3) \quad \begin{cases} -(a(x)u'(x))' = f(x), & \text{pour } x \in]-1; 1[, \\ u(-1) = u(1) = 0. \end{cases}$$

Dans cet exemple, nous prendrons $a(x) = x^2 + 1$, et la solution $u(x) = (1 - x^2)/2$, ce qui donne $f(x) = 3x^2 + 1$.

Le problème direct consiste à calculer u , étant donné a et f . Pour le problème inverse, nous considérerons que f est connue, et nous chercherons à retrouver le coefficient a à partir d'une mesure de u . Pour cet exemple, volontairement simplifié, nous supposons que l'on mesure u en tout point de l'intervalle $] - 1; 1[$, ce qui est bien évidemment irréaliste. Nous allons voir que même dans cette situation optimiste, nous sommes susceptibles de rencontrer des difficultés.

En intégrant l'équation du problème, et en divisant par u' , nous obtenons l'expression suivante pour a (en supposant que u' ne s'annule pas, ce qui est faux sur notre exemple) :

$$(4) \quad a(x) = \frac{C}{u'(x)} + \frac{1}{u'(x)} \int_0^x f(\xi) d\xi = \frac{C}{x} + x^2 + 1,$$

pour $x \neq 0$, et où C est une constante d'intégration.

Nous voyons que, même dans ce cas particulier, a n'est pas déterminé par les données, c'est-à-dire u . Bien entendu dans ce cas, il est clair que la bonne solution correspond à $C = 0$, puisque c'est la seule valeur pour laquelle a est borné. Pour pouvoir discriminer parmi les différentes solutions possibles, nous avons du faire appel à une information supplémentaire (on parle généralement d'information a priori).

Il y a dans ce problème deux sources d'instabilité : tout d'abord l'équation fait intervenir u' , et nous venons de voir que le passage de u à u' est source d'instabilité. Il s'agit là d'un phénomène commun aux problèmes linéaires et non-linéaires. Par contre, la division par u' montre une instabilité spécifique des problèmes non-linéaires. Si u' s'annule, la division est impossible. Si u' est simplement petit, la division sera cause d'instabilité.

2. ASSIMILATION DE DONNÉES

2.1. Introduction. L'assimilation de données est l'ensemble des techniques qui permettent de combiner, de façon optimale (en un sens à définir), l'information mathématique contenue dans les équations modélisant le phénomène, et l'information physique provenant des observations, en vue de reconstituer l'état du système.

Dans un cadre géophysique (e.g. météorologie ou océanographie), grâce notamment aux puissants moyens de calcul maintenant disponibles, la modélisation en vue de la prévision a connu d'importants développements ces dernières décennies. Les fluides géophysiques : l'air, l'eau atmosphérique, océanique ou terrestre sont régis par les équations générales de la mécanique des fluides : conservation de masse, de l'énergie, loi de comportement, toutefois certaines spécificités doivent être prises en compte.

2.2. Spécificités en géophysique. Les processus géophysiques sont fondamentalement non-linéaires d'abord en raison de leur aspect fluide et aussi de certains processus physiques propres comme les transferts radiatifs. Il y a donc des interactions entre les différentes échelles en temps et en espace. La résolution numérique des équations impose des discrétisations donc des troncatures dans les échelles. Cependant les phénomènes de taille inférieure à la troncature peuvent correspondre à de très importants flux d'énergie dont il faudra tenir compte dans la modélisation. A titre d'exemple un nuage de type cumulo-nimbus a une taille caractéristique de l'ordre de 10km. dans toutes les directions, un modèle de circulation générale a des mailles de l'ordre de 50 à 100 km. Or l'énergie thermique (chaleur latente) d'un tel nuage est considérable, de même les vitesses verticales caractéristiques d'un modèle de circulation générale sont de l'ordre du centimètre ou du décimètre par seconde. Dans un nuage on a pu mesurer des vitesses verticales de l'ordre de 100 mètres par seconde. Il convient donc de représenter ces flux d'énergie dans les équations discrétisées par l'adjonction de termes supplémentaires. Nécessairement ces termes, dits de paramétrisation, inclueront des coefficients empiriques non accessibles à la mesure expérimentale. Néanmoins il faudra estimer ces grandeurs à partir de données d'observation.

Mais les seules équations de la dynamique des fluides ne sont pas suffisantes pour faire une prévision, il faut en outre une condition initiale et des conditions aux limites. Dans la plupart des cas les fluides géophysiques n'ont pas de frontières naturelles, pas plus qu'une condition initiale, comme une solution stationnaire, ne s'impose naturellement. Là aussi ces termes de bord devront être estimés à partir de données d'observation.

On voit que la modélisation devra tenir compte des données d'observation. Or, a priori, données et modèles ne sont pas nécessairement compatibles : une même donnée de vent ou de température pourra être utilisée dans un modèle de circulation générale tout aussi bien que dans un modèle local d'écoulement. Selon le contexte (le modèle) la mesure recevra une interprétation différente.

2.3. Analyse. L'analyse est le résultat de l'assimilation de données. Si le système est sur-déterminé par les observations, alors l'étape d'analyse se résume essentiellement à un problème d'interpolation. Mais dans la plupart des cas, le système est sous-déterminé, car les données sont éparses et pas forcément directement reliées aux variables du modèle (ex : météo - données satellites).

De manière à rendre le problème bien posé, il est nécessaire de rajouter une information supplémentaire, par exemple sur une estimation a priori de l'état du système. Dans le cadre météo, il peut s'agir d'une information de climatologie, mais il peut aussi s'agir d'un état trivial (constant, ou nul) d'un point de vue mathématique.

Il existe essentiellement deux grandes catégories d'assimilation de données. Les méthodes séquentielles ne tiennent compte que des observations disponibles avant l'instant d'analyse. C'est typiquement le cas pour de l'assimilation en temps réel. Dans les méthodes variationnelles, on cherchera à identifier l'état du système à un instant, en utilisant des observations passées, présentes ou futures.

2.4. Estimation de paramètres : vecteur d'état, contrôle, et observations.

2.4.1. *Vecteur d'état.* La première étape de la formulation mathématique du problème inverse est de définir le cadre de travail. On suppose que le système physique considéré peut être représenté par un vecteur x , qu'on appelle le vecteur d'état. L'espace dans lequel vit ce vecteur, l'espace des états, peut être de dimension infinie ou finie, suivant que le problème a été discrétisé ou non (ou projeté sur une base).

Nous aurons besoin dans la suite de l'état réel (ou état vrai) du système, x_t , qui est la meilleure représentation possible de la réalité dans l'espace des états. On notera x_b l'ébauche de l'état du système, qui pourra servir pour régulariser le problème et le rendre bien posé. Et enfin, l'analyse x_a , qui est l'état obtenu après assimilation.

Dans le cadre de l'assimilation de données en géophysique, on se placera en dimension finie en supposant que l'ensemble du problème a été discrétisé en espace : le phénomène physique est discrétisé sur une grille de points en espace. On notera n la dimension de l'espace des états. Autrement dit, $x \in \mathbb{R}^n$.

2.4.2. *Vecteur de contrôle.* Le vecteur de contrôle correspond aux variables que l'on souhaite identifier, ou de façon équivalente sur lesquelles on peut influencer (ou modifier les valeurs), afin de faire coller la sortie du modèle avec les observations.

Dans le cas d'un système météo ou océano, il s'agit généralement de l'état complet du système à un instant donné. Dans certains cas, il peut s'avérer suffisant d'identifier l'état seulement dans une partie du domaine, afin de réduire la dimension de l'espace de contrôle (et donc du problème).

On cherche généralement l'état analysé sous la forme suivante :

$$x_a = x_b + \delta x,$$

où la correction (ou l'incrément) δx est telle que l'état analysé x_a est aussi proche que possible de l'état réel du système x_t . Au lieu de chercher l'analyse, on peut chercher de façon équivalente la correction δx par un simple changement de variable.

Sauf mention contraire, on cherchera donc le contrôle (x_a ou δx) dans l'espace de contrôle \mathbb{R}^n .

2.4.3. *Observations.* Comme pour le vecteur d'état ou de contrôle, on suppose que les différentes observations sont regroupées dans un vecteur d'observations y . Ce vecteur vit dans un espace dit d'observations, qui est généralement distinct de l'espace des états (ou de celui du contrôle). En effet, d'un point de vue physique, il est généralement impossible d'observer complètement l'état du système. Et souvent, les mesures portent sur des quantités physiques différentes de celles de l'état.

Afin de pouvoir malgré tout comparer les observations avec l'état du système, il est nécessaire de disposer d'un opérateur H , que l'on appelle opérateur d'observation, allant de l'espace des états dans l'espace d'observations. Pour un état x donné, $H(x)$ appartient à l'espace des observations.

En dimension finie, dans un cadre linéaire, on peut imaginer que chaque ligne de la matrice H représente un opérateur d'interpolation entre les points de grille du modèle discret et les points d'observation.

On notera p la dimension de l'espace des observations. On considèrera que $y \in \mathbb{R}^p$. H est donc un opérateur (pas forcément linéaire) de \mathbb{R}^n dans \mathbb{R}^p .

2.4.4. Modélisation des erreurs. Il existe un certain nombre d'incertitudes, que ce soit dans l'ébauche de l'état du système, dans le processus d'observation, ou dans l'étape d'analyse. Il faudrait d'un point de vue stochastique représenter tous ces phénomènes par des variables aléatoires suivant des lois, et considérer leur fonction de densité de probabilité (ou fonction de répartition).

Dans la suite, on pourra considérer les trois erreurs suivantes :

- erreur d'ébauche : c'est $\varepsilon_b = x_b - x_t$, l'écart entre l'ébauche et l'état réel du système. Si cette erreur est nulle, alors l'analyse est triviale : on conserve l'ébauche, sans tenir compte des observations.
- erreurs d'observation : $\varepsilon_o = y - H(x_t)$, c'est l'écart entre les observations et l'état correspondant dans l'espace des observations à la réalité. Si cette erreur est nulle, alors les observations sont un reflet exact de la réalité.
- erreur d'analyse : c'est $\varepsilon_a = x_a - x_t$, l'écart entre l'analyse et l'état réel du système. On espère qu'après assimilation, l'erreur d'analyse est plus petite que l'erreur sur l'ébauche.

Pour chacune de ces erreurs, la valeur moyenne $\bar{\varepsilon}$ est appelé biais. C'est le signe d'une dérive dans le modèle (mauvaise modélisation), ou d'un biais systématique dans les observations (problème dans l'appareil de mesure).

On peut représenter les erreurs à l'aide de leurs covariances. La matrice de covariance d'une erreur ε est l'espérance mathématique de la matrice $(\varepsilon - \bar{\varepsilon})(\varepsilon - \bar{\varepsilon})^T$. On notera $B \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ la matrice de covariance d'erreurs sur l'ébauche, et $R \in \mathcal{M}_p(\mathbb{R})$ celle des erreurs d'observation.

3. MOINDRES CARRÉS

3.1. Notations et hypothèses. On rappelle que la dimension de l'espace des états (ou espace modèle) est n , et celle de l'espace des observations est p . Dans un contexte géophysique, on a généralement $p \ll n$.

On note :

- x_t l'état *vrai* (ou réel) du système (dimension n);
- x_b une ébauche de l'état du modèle (dimension n);
- x_a l'état analysé du modèle (dimension n);
- y le vecteur d'observations (dimension p);
- H l'opérateur d'observation (défini d'un espace de dimension n dans un espace de dimension p);
- B la matrice de covariance des erreurs d'ébauche ($x_b - x_t$) (dimension $n \times n$);
- R la matrice de covariance des erreurs d'observation ($y - H(x_t)$) (dimension $p \times p$);
- A la matrice de covariance des erreurs d'analyse ($x_a - x_t$) (dimension $n \times n$).

Les hypothèses suivantes sont couramment faites :

- l'opérateur d'observation est linéaire, ou linéarisé : on suppose que $H(x) - H(x_b) = H(x - x_b)$;
- B et R sont des matrices définies positives (les erreurs ne sont pas nulles);
- il n'y a pas de biais dans les erreurs : les espérances des erreurs d'ébauche et d'observations sont nulles, $E(x_b - x_t) = 0 = E(y - H(x_t))$;
- les erreurs d'ébauche et d'observations sont décorréliées : $E((x_b - x_t)(y - H(x_t))^T) = 0$;
- l'analyse est linéaire : on cherche une correction qui dépend linéairement des observations et de l'ébauche. On cherche généralement à faire apparaître le vecteur d'innovation, $y - H(x_b)$;
- l'analyse est optimale : on cherche un état analysé qui est aussi près que possible de l'état réel du système, au sens des moindres carrés, ou du minimum de variance.

3.2. Moindres carrés.

Théorème 3.1. *L'estimateur moindres carrés optimal, ou BLUE (Best Linear Unbiased Estimator), est défini par l'interpolation suivante :*

$$(5) \quad x_a = x_b + K(y - H(x_b)), \quad K = BH^T(HBH^T + R)^{-1},$$

où l'opérateur linéaire K est appelé *gain*, ou *matrice de gain de l'analyse*. L'état analysé x_a est *optimal* : il est le plus près de l'état réel du système x_t au sens des moindres carrés.

Démonstration. La preuve s'appuie fortement sur le théorème suivant, donc nous démontrerons les deux théorèmes en même temps. \square

Théorème 3.2. *La matrice de covariance d'erreur d'analyse est, pour n'importe quel gain K ,*

$$(6) \quad A = (I - KH)B(I - KH)^T + KRK^T.$$

Si K est le gain optimal (au sens des moindres carrés), l'expression devient :

$$(7) \quad A = (I - KH)B.$$

Démonstration. L'erreur d'analyse est

$$\begin{aligned}\varepsilon_a &= x_a - x_t = x_a - x_b + x_b - x_t = K(y - H(x_b)) + \varepsilon_b \\ &= K(y - H(x_t) + H(x_t) - H(x_b)) + \varepsilon_b = K(\varepsilon_o - H\varepsilon_b) + \varepsilon_b,\end{aligned}$$

donc $\varepsilon_a = (I - KH)\varepsilon_b + K\varepsilon_o$. La matrice de covariance d'erreur d'analyse est donc :

$$\begin{aligned}A &= E(\varepsilon_a \varepsilon_a^T) = E([(I - KH)\varepsilon_b + K\varepsilon_o][(I - KH)\varepsilon_b + K\varepsilon_o]^T) \\ &= (I - KH)E(\varepsilon_b \varepsilon_b^T)(I - KH)^T + KE(\varepsilon_o \varepsilon_o^T)K^T\end{aligned}$$

par décorrélation des erreurs d'observations et d'ébauche.

Afin d'obtenir la matrice *optimale*, il faut minimiser la variance de l'erreur d'analyse. On peut voir l'expression de A comme une fonction $A(K)$. Calculons la dérivée de $A(K)$:

$$A(K + \varepsilon L) - A(K) = -\varepsilon LHB(I - KH)^T - \varepsilon(I - KH)B(LH)^T + \varepsilon^2(LH)B(LH)^T + \varepsilon LRK^T + \varepsilon KRL^T + \varepsilon^2 LRL^T$$

donc en divisant par ε et en faisant tendre ε vers 0, on obtient :

$$\frac{1}{\varepsilon}[A(K + \varepsilon L) - A(K)] \rightarrow -LHB(I - KH)^T - (I - KH)B(LH)^T + LRK^T + KRL^T.$$

On peut factoriser le résultat :

$$\frac{dA}{dK} \cdot L = L[(HBH^T + R)K^T - HB] + [K(HBH^T + R) - BH^T]L^T$$

et on voit que la dérivée est nulle, quelle que soit la matrice test L si et seulement si

$$K(HBH^T + R) - BH^T = 0 \Leftrightarrow K = BH^T(HBH^T + R)^{-1},$$

les matrices B et R étant symétriques définies positives. En choisissant cette matrice de gain, la variance de l'erreur est alors minimale, donc l'estimateur est le meilleur possible.

Il nous reste à substituer l'expression de K dans la matrice A :

$$A = (I - KH)B - BH^T K^T + KHBH^T K^T + KRK^T = (I - KH)B + [K(HBH^T + R) - BH^T]K^T,$$

ce qui se simplifie en $A = (I - KH)B$ pour la matrice K optimale. \square

Théorème 3.3. *L'analyse BLUE est obtenue de façon équivalente comme le minimum du problème d'optimisation suivant : $x_a = \arg \min J$, avec*

$$(8) \quad J(x) = (x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b) + (y - H(x))^T R^{-1}(y - H(x)) = J_b(x) + J_o(x),$$

où J est la fonction coût de l'analyse, J_b est la partie du coût correspondant à l'ébauche, et J_o aux observations.

Démonstration. La minimisation a un sens, car J_o est une fonctionnelle convexe, et J_b est strictement convexe, donc J est strictement convexe (c'est une forme quadratique). Elle admet alors un unique minimum, qui est caractérisé par l'équation d'Euler : le gradient de J est nul à l'optimum.

$$\begin{aligned}\nabla J(x) &= 2B^{-1}(x - x_b) - 2H^T R^{-1}(y - Hx) = 0 \\ \Leftrightarrow B^{-1}(x - x_b) - H^T R^{-1}(y - Hx_b) - H^T R^{-1}H(x - x_b) &= 0 \\ \Leftrightarrow x - x_b &= (B^{-1} + H^T R^{-1}H)^{-1}H^T R^{-1}(y - Hx_b)\end{aligned}$$

et donc le minimum est donné par

$$x = x_b + (B^{-1} + H^T R^{-1}H)^{-1}H^T R^{-1}(y - Hx_b).$$

L'équivalence avec l'analyse du BLUE se fait en utilisant le résultat d'algèbre linéaire suivant :

$$(B^{-1} + H^T R^{-1} H)^{-1} H^T R^{-1} = B H^T (H B H^T + R)^{-1}.$$

Il suffit de multiplier les deux côtés de l'égalité par $(B^{-1} + H^T R^{-1} H)$ à gauche et par $(H B H^T + R)$ à droite, et on obtient :

$$\begin{aligned} H^T R^{-1} (H B H^T + R) &= (B^{-1} + H^T R^{-1} H) (B H^T) \\ \implies H^T R^{-1} H B H^T + H^T &= H^T + H^T R^{-1} H B H^T, \end{aligned}$$

ce qui est évidemment vrai. Donc le minimum de la fonction coût J est bien l'état analysé par le BLUE. \square

3.3. Remarques. Les hypothèses nécessaires pour obtenir les résultats énoncés dans les théorèmes peuvent être contournées.

En ce qui concerne les matrices de covariance, si celle concernant l'ébauche n'est pas définie positive, on peut toujours restreindre l'espace de contrôle à l'orthogonal du noyau de B , ce qui, d'après l'expression de l'analyse, reviendra à ne pas corriger dans l'analyse les directions où l'ébauche est bonne (erreur nulle). De même, la matrice R^{-1} pourrait avoir des valeurs propres nulles, il suffit alors d'éliminer les observations correspondantes, puisque l'erreur correspondante est infinie. Si la matrice H n'est pas une surjection, on peut également éliminer des observations, certaines étant redondantes.

L'hypothèse de biais nul est plus vraisemblable, car les appareils de mesure par exemple en sont souvent pourvus. Si les biais sont connus, on peut les soustraire des valeurs des observations ou de l'ébauche pour se ramener à une situation non biaisée. S'ils ne sont pas connus, il est possible d'en obtenir une bonne approximation en étudiant les statistiques (notamment la moyenne) des écarts entre observations, ébauche, et état du système.

L'hypothèse de décorrélation entre les erreurs est plus crédible, car l'erreur sur l'ébauche semble naturellement décorrélée des erreurs de mesures (même si parfois l'ébauche utilisée s'appuie sur les observations).

L'hypothèse linéaire tangente (qui concerne l'opérateur d'observation ici, mais qui peut également concerner le modèle) est justifiée au moins lorsque les états sont relativement proches. En effet, la variation d'une fonction peut s'approcher par sa dérivée lorsque l'écart n'est pas trop grand : en première approximation, $H(x + \delta x) - H(x) \simeq H'(x)\delta x$. En supposant que les états considérés ne s'éloignent pas trop de l'ébauche (ce qui est généralement le cas, puisqu'il y a notamment un terme de rappel dans la fonction coût), alors on peut linéariser (ou dériver) l'opérateur d'observation autour de la solution x_b .

3.4. Un exemple simple. Supposons que l'on souhaite estimer la température T_t de la pièce. Pour cela, on utilise un thermomètre de précision connue (σ_o sera l'écart-type de l'erreur de mesure), et on observe la température T_o . On suppose que la moyenne de T_o est T_t , avec une variance σ_o^2 . En absence d'autre information, la meilleure estimation de la température sera donc T_o , avec une précision de σ_o .

On suppose maintenant qu'on a une autre information sur la température de la pièce. Il peut s'agir d'une autre mesure avec un autre thermomètre (indépendant), mais il peut s'agir de constatations simples, comme par exemple le ressenti, la façon dont les gens sont habillés dans la pièce, la température dans la pièce la veille, ... On suppose que cette information a priori permet de définir une ébauche

de la température T_b , indépendamment de la mesure que l'on peut faire avec le thermomètre (observation). On suppose que l'espérance de T_b est T_t (pas de biais), et que son écart-type est σ_b . C'est la meilleure estimation en absence d'autre information.

Maintenant, si l'on combine la mesure T_o avec l'ébauche T_b , on peut chercher un compromis entre les deux, avec l'analyse suivante :

$$T_a = kT_o + (1 - k)T_b$$

ou encore $T_a = T_b + k(T_o - T_b)$.

La variance de l'erreur de cette estimation est

$$\sigma_a^2 = (1 - k)^2\sigma_b^2 + k^2\sigma_o^2$$

si on suppose les erreurs décorréelées. La valeur de k qui minimise la variance de l'erreur d'analyse est

$$k = \frac{\sigma_b^2}{\sigma_b^2 + \sigma_o^2}.$$

Une façon équivalente d'obtenir l'analyse T_a est de minimiser la fonction coût

$$J(T) = J_b(T) + J_o(T) = \frac{(T - T_b)^2}{\sigma_b^2} + \frac{(T - T_o)^2}{\sigma_o^2}.$$

Chacun des deux termes est une fonction quadratique dont la minimisation tend vers l'ébauche et l'observation respectivement, alors que la minimisation de J va chercher à faire un compromis entre les deux.

Si l'observation mesurée par le thermomètre est très mauvaise ($\sigma_o \gg \sigma_b$), alors k sera proche de 0, ce qui revient à prendre $T_a \simeq T_b$. L'analyse ne tiendra donc pas compte de la mesure (très mauvaise).

À l'inverse, si l'observation est très précise ($\sigma_o \ll \sigma_b$), alors k sera proche de 1, ce qui revient à prendre $T_a \simeq T_o$: on utilise directement la mesure, comme elle est très fiable.

Si les deux estimations T_o et T_b ont la même précision ($\sigma_o = \sigma_b$), alors k sera égal à $\frac{1}{2}$, et T_a sera simplement la moyenne de T_o et T_b .

Enfin, si on regarde la variance de l'erreur d'analyse, on trouve

$$\frac{1}{\sigma_a^2} = \frac{1}{\sigma_o^2} + \frac{1}{\sigma_b^2},$$

ou encore $\sigma_a^2 = k\sigma_o^2 = (1 - k)\sigma_b^2$. Cela montre que dans tous les cas, l'erreur d'analyse est inférieure à la fois à l'erreur d'observation et à celle d'ébauche. Et elle est la plus petite quand les erreurs d'observation et d'ébauche sont égales, et alors la variance de l'erreur d'analyse est deux fois plus petite.

4. 3D-VAR ET INTERPOLATION OPTIMALE

Le 3D-VAR et l'interpolation optimale sont deux méthodes d'assimilation de données très basiques, reposant toutes deux sur l'estimateur moindres carrés qui a été construit au chapitre précédent. On a vu l'équivalence entre l'analyse du BLUE, et la minimisation d'une fonction coût. Ces deux approches servent de base à l'interpolation optimale et au 3D-VAR respectivement. Comme nous allons le voir, la difficulté réside dans le calcul effectif de la solution, surtout en grande dimension.

4.1. Interpolation optimale. L'interpolation optimale est une méthode consistant à calculer effectivement les formules de l'analyse du BLUE :

$$(9) \quad x_a = x_b + K(y - Hx_b), \quad K = BH^T(HBH^T + R)^{-1}.$$

En effet, dans un contexte météorologique ou océanographique, la taille du vecteur d'état (et donc des matrices correspondantes) peut atteindre $n = 10^9$. Le produit matriciel ou le calcul de matrices inverses peut s'avérer délicat dans des espaces de telle dimension.

L'écriture de l'analyse comme étant l'ébauche corrigée par un incrément, peut être vue comme un système d'équations scalaires, une pour chaque variable du modèle. Pour chaque variable, l'incrément d'analyse est donné par la ligne correspondante de la matrice K , multipliée par le vecteur d'innovation $y - Hx_b$.

L'hypothèse fondamentale de l'interpolation optimale est que pour chaque élément du vecteur d'état, très peu d'observations sont importantes pour déterminer l'incrément d'analyse. L'algorithme est alors le suivant :

- (1) Pour chaque composante $x(i)$ du vecteur d'état, sélectionner un *petit* nombre p_i d'observations, jugées significatives pour corriger $x(i)$.
- (2) Calculer les composantes correspondantes du vecteur d'innovation $(y - Hx_b)_i$, ainsi que les covariances d'erreur entre les $x(i)$ et le vecteur d'état interpolé aux points d'observation (i.e. les p_i coefficients significatifs correspondants de la ligne i de BH^T), et les sous-matrices $p_i \times p_i$ correspondantes des matrices de covariance d'erreur d'ébauche et d'observation (formées par les restrictions de HBH^T et R aux observations sélectionnées).
- (3) Inverser la matrice $p_i \times p_i$, définie positive, restriction de $(HBH^T + R)$ aux observations sélectionnées (par exemple par une méthode LU).
- (4) Multiplier cet inverse par la ligne i de BH^T pour obtenir la ligne correspondante de K .

On peut gagner encore en temps de calcul en ne calculant pas l'inverse de la matrice, mais en résolvant le système linéaire correspondant.

Le point crucial réside dans le choix des observations considérées comme significatives. Généralement, la zone d'influence des observations sur l'analyse est assez restreinte spatialement. On choisit en pratique les observations disponibles dans un certain voisinage du point considéré.

4.2. 3D-VAR. Le principe du 3D-VAR est de considérer le problème de minimisation de la fonction coût suivante :

$$(10) \quad J(x) = (x - x_b)^T B^{-1} (x - x_b) + (y - Hx)^T R^{-1} (y - Hx),$$

qui, comme nous l'avons vu, fournira la même analyse. Mais comme les matrices (dont celle de gain K) peuvent être délicates à manipuler en grande dimension, on préfère résoudre le problème de minimisation en utilisant une méthode de gradient.

Le gradient de la fonction coût est

$$\nabla J(x) = 2B^{-1}(x - x_b) - 2H^T R^{-1}(y - Hx).$$

L'approximation tient ici dans le fait que seul un nombre fini (et faible) d'itérations seront réalisées dans l'algorithme de minimisation. On arrêtera la minimisation soit après un nombre maximal d'itérations, pour garantir un coût de calcul maximal, soit lorsque la norme du gradient de la fonctionnelle aura suffisamment diminué.

En pratique, on utilise l'ébauche x_b comme point de départ de la minimisation. Et on utilise un algorithme de type Newton pour l'optimisation.

4.3. Information contenue dans la Hessienne. On a vu que dans le cas de l'interpolation optimale, si la matrice de gain K a été calculée, alors la matrice de covariance d'erreurs d'analyse est donnée par

$$A = (I - KH)B(I - KH)^T + KRK^T,$$

qui se résume à $A = (I - KH)B$ dans le cas où la matrice K est la matrice de gain optimal.

Dans le cas variationnel, les covariances d'erreur d'analyse peuvent être obtenues grâce à la dérivée seconde de la fonction coût.

Théorème 4.1. *La Hessienne de la fonction coût du 3D-VAR donne une information sur les statistiques d'erreur de l'analyse :*

$$(11) \quad A = \left(\frac{1}{2} \nabla^2 J \right)^{-1}.$$

Démonstration. On doit calculer la dérivée seconde de la fonction coût :

$$\begin{aligned} J(x) &= (x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b) + (y - Hx)^T R^{-1}(y - Hx), \\ \nabla J(x) &= 2B^{-1}(x - x_b) - 2H^T R^{-1}(y - Hx), \\ \nabla^2 J(x) &= 2(B^{-1} + H^T R^{-1}H). \end{aligned}$$

À l'optimum, le gradient est nul, ce qui implique que

$$\begin{aligned} 0 &= B^{-1}(x_a - x_b) - H^T R^{-1}(y - Hx_a) \\ &= B^{-1}(x_a - x_t + x_t - x_b) - H^T R^{-1}(y - Hx_t + H(x_t - x_a)) \\ &= B^{-1}(x_a - x_t) - B^{-1}(x_b - x_t) - H^T R^{-1}(y - Hx_t) - H^T R^{-1}H(x_t - x_a) \end{aligned}$$

et donc

$$(B^{-1} + H^T R^{-1}H)(x_a - x_t) = B^{-1}(x_b - x_t) + H^T R^{-1}(y - Hx_t).$$

Si on multiplie à droite par la transposée de ces vecteurs, et qu'on prend l'espérance mathématique, les termes croisés $E((x_b - x_t)(y - Hx_t)^T)$ sont nuls, par décorrélation des erreurs. On obtient donc, en utilisant la symétrie des matrices :

$$(B^{-1} + H^T R^{-1}H)A(B^{-1} + H^T R^{-1}H) = B^{-1}BB^{-1} + H^T R^{-1}RR^{-1}H = B^{-1} + H^T R^{-1}H,$$

ce qui prouve le résultat en divisant par $(B^{-1} + H^T R^{-1}H)$ (qui est inversible). \square

5. MÉTHODES VARIATIONNELLES : CONTRÔLE OPTIMAL, ÉTAT ADJOINT

Nous allons étudier dans cette partie le 4D-VAR, qui est une généralisation du 3D-VAR pour des observations distribuées dans le temps. On tient donc compte désormais d'un modèle d'évolution (dans le temps) qui permettra de comparer l'état du système avec les observations à l'instant approprié.

La fenêtre d'assimilation est un intervalle de temps donné, l'analyse est réalisée à l'instant initial, et on suppose les observations distribuées sur m instants $(t_i)_{0 \leq i \leq m}$ dans l'intervalle. On notera $y(t_i)$ les observations, $x(t_i)$ l'état du système, et $x_t(t_i)$ l'état vrai du système, à l'instant t_i . La matrice de covariance des erreurs d'observations à l'instant t_i est notée R_i . L'opérateur d'observation correspondant est noté H_i . Par contre, la matrice de covariance d'erreur d'ébauche est toujours notée B , car elle n'est définie qu'à l'instant initial, l'ébauche x_b étant une estimation a priori de l'analyse, donc à l'instant initial.

5.1. 4D-VAR : assimilation variationnelle en dimension 4. Dans sa formulation générale, le principe du 4D-VAR est de considérer la minimisation de la fonction coût suivante :

$$(12) \quad J(x_0) = (x_0 - x_b)^T B^{-1} (x_0 - x_b) + \sum_{i=0}^m (y_i - H_i(x(t_i)))^T R_i^{-1} (y_i - H_i(x(t_i))).$$

La minimisation de cette fonction coût est réalisée sous contrainte. Il s'agit d'une contrainte forte de modèle, puisque l'écriture de $J(x)$ dépend des valeurs $x(t_i)$, qui elles-mêmes dépendent de la condition initiale x_0 .

D'un point de vue *continu*, on peut supposer que le modèle dynamique d'évolution s'écrit de la façon suivante :

$$(13) \quad \frac{dx}{dt} = F(x), \quad x(0) = x_0.$$

Mais on peut également écrire le problème de façon *discrète*, en supposant que la suite des états du modèle $x(t_i)$ s'écrit de la façon suivante :

$$(14) \quad x(t_i) = M_{0 \rightarrow t_i}(x_0),$$

où $M_{0 \rightarrow t_i}$ est l'opérateur modèle (ou la résolvante) permettant de passer de l'instant initial à l'instant t_i .

Le 4D-VAR est donc un problème compliqué de minimisation non linéaire sous contrainte. On peut le simplifier à l'aide des deux hypothèses suivantes :

- **Causalité** : le modèle d'évolution peut s'écrire comme une suite de modèles intermédiaires, permettant de passer d'un instant au suivant. On peut supposer que M_0 est l'identité (permettant de passer de l'instant 0 à lui-même), et si on note M_i la résolvante du modèle permettant de passer de l'instant t_{i-1} à t_i , alors $x_i = M_i x_{i-1}$, et donc par récurrence,

$$x_i = M_i M_{i-1} \dots M_1 x_0.$$

- **Approximation linéaire tangente** : la fonction coût peut être rendue quadratique en supposant, en plus de la linéarisation des opérateurs d'observation H_i , que le modèle M peut être linéarisé. On pourra alors remplacer le modèle par son approximation linéaire tangente (ou sa dérivée), et M sera alors le modèle linéaire tangent. Il s'agit du même procédé que pour les opérateurs d'observation H (voir chapitres précédents). Cette hypothèse est généralement valide si la période d'assimilation n'est pas trop longue.

Ces deux hypothèses permettent de se ramener à un problème d'optimisation linéaire et sans contrainte, ce qui est plus simple à résoudre. Le premier terme J_b de J est le même que dans le 3D-VAR, c'est un terme de rappel à l'ébauche, qui agit également comme une régularisation. Le deuxième terme J_o est par contre plus compliqué, puisqu'il inclut la résolution du modèle d'évolution.

5.2. Modèle adjoint et minimisation. Le calcul de $J(x_0)$ semble complexe à cause du modèle à intégrer, et celui de son gradient paraît encore plus délicat. Toutefois, il est possible de calculer très rapidement celui-ci.

Théorème 5.1. *L'évaluation de la fonction coût du 4D-VAR $J(x_0)$ et de son gradient $\nabla J(x_0)$ nécessite une intégration du modèle direct, de l'instant initial jusqu'à l'instant final, et une intégration du modèle adjoint.*

Démonstration. La première étape est d'intégrer le modèle direct, de l'instant initial avec x_0 jusqu'à l'instant final pour calculer $x(t_n)$, tout en calculant à chaque étape i intermédiaire :

- les états intermédiaires $x(t_i) = M_i x(t_{i-1})$;
- les vecteurs d'innovation normalisés $d_i = R_i^{-1}(y_i - H_i x(t_i))$ qui sont stockés ;
- les contributions au deuxième terme de la fonction coût $J_{o_i}(x_0) = (y_i - H_i x(t_i))^T d_i$;
- et finalement $J_o(x_0) = \sum_{i=0}^m J_{o_i}(x_0)$.

Il suffit d'ajouter le terme $J_b(x_0)$ qui ne pose aucune difficulté.

Pour calculer le gradient, il faut passer par une réécriture :

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2}\nabla J_o(x_0) &= \sum_{i=0}^m M_1^T \dots M_i^T H_i^T d_i \\ &= H_0^T d_0 + M_1^T [H_1^T d_1 + M_2^T [H_2^T d_2 + \dots + M_n^T H_n^T d_n] \dots], \end{aligned}$$

ce qui peut se calculer de la façon suivante :

- initialiser l'état adjoint p à 0 à l'instant final : $p(t_n) = 0$;
- à chaque étape $i - 1$, l'état adjoint $p(t_{i-1})$ est déduit de la valeur de l'état adjoint à l'instant t_i en utilisant le modèle adjoint (qui est l'adjoint du modèle linéaire tangent) entre les instants i et $i - 1$: $p(t_{i-1}) = M_i^T (p(t_i) + H_i^T d_i)$;
- à la fin, on obtient à l'instant initial $-\frac{1}{2}\nabla J_o(x_0) = p(0)$.

Le gradient de J_b ne pose aucun problème. □

Une fois la fonction coût et son gradient calculés, la minimisation est réalisée à l'aide d'une méthode de gradient (du type Newton).

Le modèle adjoint est donc un modèle qui se résout de façon rétrograde en temps, et qui est forcé par les vecteurs d'innovation $H_i^T d_i$, qui dépendent de la distance entre les observations et la trajectoire du modèle direct. On voit notamment que si la trajectoire directe colle parfaitement avec les observations, le forçage devient nul, et comme le modèle adjoint est linéaire et qu'il est initialisé par 0, la valeur du gradient est donc nulle.

En comparaison avec le 3D-VAR, les caractéristiques principales du 4D-VAR sont :

- il fonctionne sous l'hypothèse que le modèle est exact, puisqu'il est vu comme une contrainte forte ;
- il nécessite le modèle adjoint (i.e. les opérateurs M_i^T) ;

- il faut attendre que toutes les observations soient disponibles tout au long de la période d'assimilation avant de commencer la minimisation ;
- une fois l'analyse réalisée (x_a sera le minimum de la fonction coût, ou une approximation après un nombre fini d'itérations dans la minimisation), la prévision est déduite en résolvant simplement le modèle direct, initialisé par l'analyse.

5.3. Lagrangien et système d'optimalité. On peut considérer le problème de façon continue, au lieu de discrétiser l'intervalle de temps en fonction des instants d'observation t_i . La minimisation de la fonction coût J se fait sous la contrainte (forte) de modèle (cf équations 12 et 13). On peut alors définir un Lagrangien pour tenir compte de cette contrainte dans l'optimisation, en réécrivant J comme une fonction à la fois de la condition initiale x_0 , mais également d'une trajectoire $x(t)$, a priori indépendant de x_0 , et on rajoute la contrainte forte que $x(t)$ soit solution du modèle dynamique, avec x_0 comme condition initiale. Plus précisément, on réécrit le problème sous forme de minimisation de la fonction coût suivante :

$$(15) \quad J(x_0, x) = (x_0 - x_b)^T B^{-1}(x_0 - x_b) + \sum_{i=1}^m (y_i - H_i(x(t_i)))^T R_i^{-1}(y_i - H_i(x(t_i)))$$

sous la contrainte que x soit solution du modèle dynamique

$$(16) \quad \frac{dx}{dt} = F(x),$$

initialisé par la condition $x(0) = x_0$.

Le Lagrangien associé à ce problème de minimisation sous contrainte est :

$$(17) \quad \mathcal{L}(x_0, x; p) = J(x_0, x) + \int_0^T p(t) \cdot \left(\frac{dx}{dt} - F(x) \right) dt.$$

On alors le résultat suivant pour faire le lien entre l'optimisation de J et celle du lagrangien \mathcal{L} .

Théorème 5.2.

$$\min_{x_0; x} J(x_0, x) \text{ (sous contrainte (16))} = \min_{x_0; x} \max_p \mathcal{L}(x_0, x; p).$$

Démonstration. Fixons x_0 et x . Soit la contrainte de modèle (16) n'est pas vérifiée par x , auquel cas le maximum sur tous les p du terme intégrale (second terme) de \mathcal{L} est $+\infty$. Soit la contrainte est vérifiée, auquel cas quel que soit p , le terme intégral est nul. Donc le maximum vaut soit $J(x_0, x)$ si la contrainte est satisfaite, soit $+\infty$ si la contrainte n'est pas satisfaite. Comme on prend ensuite le minimum sur x_0 et x , on voit donc que ce minimum vaut exactement le minimum de J pour tous les (x_0, x) qui vérifient la contrainte de modèle. \square

On cherche donc un point-selle $(x_0, x; p)$ du Lagrangien : maximum par rapport à p , minimum par rapport à (x_0, x) .

En faisant des hypothèses sur la convexité des fonctions (qui seront vérifiées notamment si on linéarise le modèle et les opérateurs d'observation, par exemple autour d'une trajectoire de référence), on peut alors chercher à caractériser le point-selle de \mathcal{L} : chacune des dérivées partielles du Lagrangien \mathcal{L} (par rapport à chacune des trois variables) est nulle, à l'optimum.

- Maximum par rapport à p : $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p}(x_0^*, x^*; p^*) = 0$.

On obtient la dérivée partielle en perturbant le Lagrangien :

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\mathcal{L}(x_0^*, x^*; p^* + \varepsilon q) - \mathcal{L}(x_0^*, x^*; p^*)}{\varepsilon} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p}(x_0^*, x^*; p^*) \cdot q$$

Par linéarité,

$$\mathcal{L}(x_0^*, x^*; p^* + \varepsilon q) - \mathcal{L}(x_0^*, x^*; p^*) = \varepsilon \int_0^T q(t) \cdot \left(\frac{dx}{dt} - F(x) \right) dt,$$

et donc par identification, la condition $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial p} = 0$ est équivalente à $\frac{dx}{dt} - F(x) = 0$ à chaque instant t . On retrouve donc la contrainte de modèle : $x(t)$ doit être une solution du modèle dynamique.

- Minimum par rapport à x : on doit réécrire le Lagrangien afin de faire apparaître la dérivée temporelle sur p et non plus sur x , pour faciliter la dérivée. En intégrant par parties, et en utilisant la condition $x(0) = x_0$, on obtient :

$$\mathcal{L}(x_0, x; p) = J(x_0, x) - \int_0^T \frac{dp}{dt} \cdot x(t) dt - \int_0^T p(t) \cdot F(x) dt + p(T) \cdot x(T) - p(0) \cdot x_0.$$

On calcule maintenant la dérivée par rapport à x :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(x_0, x + \varepsilon y; p) - \mathcal{L}(x_0, x; p) &= J(x_0, x + \varepsilon z) - J(x_0, x) \\ - \varepsilon \int_0^T \frac{dp}{dt} \cdot z(t) dt - \int_0^T p(t) \cdot (F(x + \varepsilon z) - F(x)) dt &+ \varepsilon p(T) \cdot z(T) - p(0)(x_0 - x_0). \end{aligned}$$

En utilisant la définition de J , les deux premiers termes valent

$$\sum_{i=1}^m [(y_i - H_i(x(t_i) + \varepsilon z(t_i)))^T R_i^{-1} (y_i - H_i(x(t_i))) - (y_i - H_i(x(t_i)))^T R_i^{-1} (y_i - H_i(x(t_i)))],$$

et en utilisant un développement de Taylor des opérateurs d'observation : $H_i(x(t_i) + \varepsilon z(t_i)) = H_i(x(t_i)) + \varepsilon H'_i(x(t_i))z(t_i) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$, si on divise par ε et qu'on fait tendre ε vers 0, on obtiendra à la limite : $-2 \sum_{i=1}^m (H'_i(x(t_i))z(t_i))^T R_i^{-1} (y_i - H_i(x(t_i)))$, ou encore

$$-2 \sum_{i=1}^m [H'_i(x(t_i))^T R_i^{-1} (y_i - H(x(t_i)))] \cdot z(t_i).$$

La deuxième intégrale va, de la même façon, tendre vers

$$- \int_0^T p(t) \cdot (F'(x)z) dt.$$

À la fin, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}(x_0^*, x^*; p^*) \cdot z &= -2 \sum_{i=1}^m [H'_i(x(t_i))^T R_i^{-1} (y_i - H(x(t_i)))] \cdot z(t_i) \\ &- \int_0^T \frac{dp}{dt} \cdot z(t) dt - \int_0^T [F'(x)]^T p(t) \cdot z(t) dt + p(T) \cdot z(T). \end{aligned}$$

Si on impose que cette dérivée est nulle, quelle que soit la fonction z , on voit déjà (en imposant n'importe quelle valeur pour $z(T)$) qu'on doit avoir

$p(T) = 0$. Ensuite, comme on a toute latitude pour choisir $z(t)$ à n'importe quel instant t , on en déduit qu'à chaque instant t , on doit avoir :

$$-\frac{dp}{dt} - [F'(x)]^T p(t) - 2 \sum_{i=1}^m H'_i(x(t_i))^T R_i^{-1} (y_i - H_i(x(t_i))) \delta_{t_i}(t) = 0,$$

ou encore

$$(18) \quad -\frac{dp}{dt} = [F'(x)]^T p(t) + 2 \sum_{i=1}^m H'_i(x(t_i))^T R_i^{-1} (y_i - H_i(x(t_i))) \delta_{t_i}(t),$$

avec la condition finale $p(T) = 0$. L'équation (18) est appelée équation adjointe, et p est l'état adjoint. C'est une équation qu'on résout de façon rétrograde en temps, en partant de la condition finale $p(T) = 0$. Le terme de *modèle* n'est pas $F(x)$ comme dans le modèle direct, mais $[F'(x)]^T p$, qui est l'adjoint du linéarisé de F . Enfin, on force le modèle par un terme source provenant des écarts entre observations et quantités correspondantes, aux instants d'observation.

- En reprenant l'expression du Lagrangien réécrite au début de l'item précédent, la dérivée par rapport à x_0 est triviale :

$$(19) \quad \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_0}(x_0^*, x^*; p^*) = 2B^{-1}(x_0 - x_b) - p(0).$$

On en déduit le système d'optimalité, qui caractérise la solution optimale :

Modèle direct :

$$\frac{dx}{dt} = F(x), \quad x(0) = x_0$$

Modèle adjoint :

$$-\frac{dp}{dt} = [F'(x)]^T p(t) + 2 \sum_{i=1}^m H'_i(x(t_i))^T R_i^{-1} (y_i - H_i(x(t_i))) \delta_{t_i}(t), \quad p(T) = 0$$

Condition d'optimalité :

$$2B^{-1}(x_0 - x_b) = p(0)$$

En pratique, la fonction coût est minimisée avec un algorithme de type gradient, la fonction coût étant calculée grâce à la résolution du modèle direct (qui permet de calculer la trajectoire $x(t)$), et le gradient est calculé grâce au modèle adjoint. En effet, si la contrainte de modèle est satisfaite, $J(x_0) = \mathcal{L}(x_0, x; p)$ et par conséquent, $\nabla J(x_0) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_0} = 2B^{-1}(x_0 - x_b) - p(0)$ (cf équation (19)).

5.4. Estimation de paramètres. La méthode du 4D-VAR permet d'estimer des paramètres en plus (ou à la place) de la condition initiale. Supposons que le modèle F dépend non seulement de la solution x , mais également d'un jeu de paramètres u . Le modèle direct est alors :

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = F(x, u), \\ x(0) = x_0. \end{cases}$$

On souhaite désormais identifier le jeu de paramètres u (en plus de la condition initiale x_0 , mais ce n'est pas obligatoire), qui minimise l'écart aux données. La

fonction coût s'écrit alors :

(20)

$$J(x_0, u) = (x_0 - x_b)^T B^{-1} (x_0 - x_b) + (u - u_b)^T Q^{-1} (u - u_b) + \sum_{i=0}^m (y_i - H_i(x(t_i)))^T R_i^{-1} (y_i - H_i(x(t_i))),$$

où u_b représente une ébauche (estimation a priori) de la valeur des paramètres u , Q est la matrice de covariance d'erreur sur cette ébauche. Le terme d'attache aux données dans la fonction coût (dernier terme) ne change pas par rapport à la situation où on cherche à identifier uniquement la condition initiale, mais désormais la contrainte est que $x(t)$ doit être une solution du modèle dépendant des paramètres.

Comme précédemment, on définit un Lagrangien pour réécrire le problème de minimisation sous contrainte :

$$(21) \quad \mathcal{L}(x_0, u, x; p) = J(x_0, u, x) + \int_0^T p(t) \cdot \left(\frac{dx}{dt} - F(x, u) \right) dt,$$

où (comme précédemment) $x(t)$ est désormais vu comme une trajectoire "quelconque", et $p(t)$ est le multiplicateur de Lagrange associé à la contrainte de modèle.

À l'optimum, les dérivées partielles du Lagrangien sont nulles, et on obtient le système d'optimalité suivant :

Modèle direct :

$$\frac{dx}{dt} = F(x, u), \quad x(0) = x_0$$

Modèle adjoint :

$$-\frac{dp}{dt} = \left[\frac{\partial F}{\partial x}(x, u) \right]^T p(t) + 2 \sum_{i=1}^m H'_i(x(t_i))^T R_i^{-1} (y_i - H_i(x(t_i))) \delta_{t_i}(t), \quad p(T) = 0$$

Condition d'optimalité pour la condition initiale :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_0} = 2B^{-1}(x_0 - x_b) - p(0) = 0$$

Condition d'optimalité pour les paramètres : on obtient une nouvelle condition en exigeant que la dérivée partielle du Lagrangien par rapport à u s'annule :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} = 2Q^{-1}(u - u_b) - \left[\frac{\partial F}{\partial u} \right]^T p = 0.$$

Lorsque la contrainte de modèle est satisfaite, $\mathcal{L}(x_0, u, x, p) = J(x_0, u)$, et donc $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_0} = \frac{\partial J}{\partial x_0}$ et $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} = \frac{\partial J}{\partial u}$. Le gradient de J par rapport aux paramètres u est donc fourni sans surcoût par l'état adjoint, ce qui permet alors de minimiser la fonction coût par rapport aux paramètres, afin d'identifier le jeu de paramètres optimal u^* .

Si le jeu de paramètres est constant (indépendant du temps), on a

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} \cdot v = \langle Q^{-1}(u - u_b), v \rangle - \int_0^T \langle [F'_u(x, u)]^T p(t), v \rangle dt = 0$$

pour tout v (vecteur indépendant du temps), ce qui implique que

$$Q^{-1}(u - u_b) - \int_0^T [F'_u(x, u)]^T p(t) dt = 0$$

à l'optimum.

5.5. Préconditionnement. Nous avons vu que dans le 4D-VAR, comme dans le 3D-VAR, nous pouvons calculer *facilement* la fonction coût et son gradient. Pour minimiser la fonctionnelle, on utilisera donc une méthode de descente, dont le but est de mettre à jour le point x en ajoutant une correction proportionnelle à $-\nabla J(x)$.

Mais la méthode de Newton n'est pas la plus efficace, et on utilise plutôt des algorithmes comme le gradient conjugué, ou les méthodes de quasi-Newton. Ces méthodes sont beaucoup plus appropriées quand la fonctionnelle n'est pas quadratique.

Différentes méthodes existent pour améliorer la minimisation : preconditionnement, construction d'une approximation de la matrice Hessienne (méthode de quasi-Newton), méthode incrémentale (voir section suivante), ...

5.5.1. Conditionnement. La principale caractéristique de la fonctionnelle, qui affecte notamment l'efficacité de la minimisation, est le conditionnement. Cette quantité mesure l'ellipticité des iso-surfaces de J , et décrit la difficulté du problème d'optimisation. En effet, moins les iso-surfaces sont circulaires, et plus le gradient ne pointe pas vers le minimum (qui est au centre), ralentissant considérablement la minimisation.

Le conditionnement est défini par le rapport entre la plus grande et la plus petite des valeurs propres de la Hessienne $\nabla^2 J$. Si le conditionnement est proche de 1, la Hessienne sera presque proportionnelle à la matrice identité, et dans ce cas, le minimum peut presque être trouvé en une seule itération car $-\nabla J(x_b)$ pointe directement vers le minimum. En général, J est elliptique, ce qui ralentit le procédé, mais il est possible d'utiliser un opérateur pour preconditionner le problème.

Théorème 5.3. *Si L est un opérateur inversible, alors le problème original :*

$$(22) \quad x_a = \arg \min J(x_0),$$

où on suppose qu'on sait construire $J(x_0)$ et $\nabla J(x_0)$, et en initialisant l'optimisation avec x_b , est équivalent au problème preconditionné suivant :

$$(23) \quad \chi_a = \arg \min \hat{J}(\chi_0),$$

avec $\hat{J}(\chi) = J(L\chi)$, $\nabla \hat{J}(\chi) = L^T \nabla J(L\chi)$, en initialisation l'optimisation avec $L^{-1}x_b$.

La solution est alors donnée par $x_a = L\chi_a$.

Dans le cas du 3D-VAR, un preconditionnement simple et efficace est d'utiliser la matrice de covariance d'erreur d'ébauche B : on décompose $B = LL^T$, et dans ce cas, la nouvelle fonction coût est

$$(24) \quad \hat{J}(\chi) = \chi^T \chi + J_o(L\chi),$$

et on voit donc que le premier terme \hat{J}_b est simplement le produit scalaire canonique. Un autre preconditionneur efficace est la racine carrée de la matrice hessienne, mais qui est beaucoup plus coûteuse à calculer.

5.6. Méthode incrémentale. La méthode incrémentale est une méthode relativement empirique, conçue pour réduire le coût de résolution d'une méthode variationnelle. Il s'agit de remplacer un grand problème compliqué par une série de problèmes plus petits et plus simples. L'idée générale est de rechercher une mise à jour *basse résolution* de l'ébauche *haute résolution*. C'est le même principe que

dans l'interpolation optimale, où on utilise l'influence souvent locale des observations pour corriger localement l'ébauche.

On note (J_h, H_h, x_h) la fonction coût, l'opérateur d'observation, et l'état du modèle, dans leur version à haute résolution. On cherche à minimiser $J_h(x_h)$, et on va résoudre des approximations successives de ce problème. On initialise avec $x_{h,i} = x_b$, et on cherche une mise à jour pour obtenir $x_{h,i+1}$. On passe alors à la boucle interne (à basse résolution) un certain nombre d'informations : les vecteurs d'innovation à haute résolution $d_{h,i} = y - H_h(x_{h,i})$, et une version basse résolution x_i de $x_{h,i}$. On utilise pour cela un opérateur de conversion (généralement d'interpolation/extrapolation) pour passer de la haute à basse résolution : $x_i = S_{h \rightarrow l}(x_{h,i})$.

En linéarisant l'opérateur d'observation à basse résolution H autour de x_i , on obtient H_i et les vecteurs d'innovation à basse résolution sont définis de la façon suivante :

$$y - H(x) = y - H(x_i) - H_i(x - x_i) \simeq y - [H_i(x - x_i) + H_h(x_{h,i})] = d_{h,i} - H_i(x - x_i)$$

de sorte que la fonction coût basse résolution à minimiser dans la boucle interne est

$$J_i(x) = (x - x_b)^T B^{-1}(x - x_b) + [d_{h,i} - H_i(x - x_i)]^T R^{-1}[d_{h,i} - H_i(x - x_i)]$$

qui est quadratique (puisque tout a été linéarisé autour de x_i). Son minimum est noté x_{i+1} . On met alors à jour l'état haute résolution en utilisant un opérateur de conversion basse vers haute résolution :

$$x_{h,i+1} = x_{h,i} + S_{l \rightarrow h}(x_{i+1}) - S_{l \rightarrow h}(x_i),$$

ce qui garantit que l'état à haute résolution (dans la boucle externe) n'est pas modifié si la boucle interne de minimisation ne change pas d'état.

L'essentiel de la minimisation a lieu à basse résolution, sur des approximations linéarisées des opérateurs, ce qui donne une fonction coût quadratique, et donc facile à minimiser. Les mises à jour, et le forçage par le vecteur d'innovation, se font à haute résolution. Dans les implémentations opérationnelles, cette méthode permet d'atteindre beaucoup plus rapidement et efficacement une bonne approximation du minimum de la fonctionnelle haute résolution.

6. MÉTHODES SÉQUENTIELLES : FILTRE DE KALMAN

Le filtre de Kalman (KF) et sa version étendue (EKF, Extended Kalman Filter) sont des extensions de l'analyse moindres carrés dans le cas de l'assimilation de données séquentielle, dans laquelle chaque ébauche est fournie par une prévision issue de l'analyse faite sur la fenêtre d'assimilation précédente. Les équations du filtre de Kalman linéaire sont les mêmes que celles décrites dans l'analyse moindres carrés. On changera certaines notations : l'ébauche est désormais notée x_f car c'est une prévision issue de la fenêtre précédente, et les matrices de covariance d'erreur d'analyse et d'ébauche (prévision) sont désormais notées P^a et P^f respectivement.

6.1. Notations et hypothèses. Les notations et hypothèses sont essentiellement les mêmes que pour l'analyse moindres carrés, ou pour le 4D-VAR, on précise juste les choses suivantes :

- Les matrices de covariance d'erreur d'ébauche et d'analyse sont notées P^f (forecast, prévision) et P^a (analysis, analyse) respectivement. L'ébauche est désormais vue comme une prévision (éventuellement provenant d'une période temporelle passée).
- L'opérateur de modèle (la résolvante) permettant de passer de l'instant t_{i-1} à l'instant t_i est noté M_i .
- Quand elle est modélisée, l'erreur de modèle est l'écart entre l'état réel du système $x_t(t_i)$ à l'instant t_i et la prévision déduite de l'état réel à l'instant passé (propagé par le modèle) : $M_i(x_t(t_{i-1}))$, et on suppose que cette erreur est non biaisée, et on note Q_i sa matrice de covariance.
- Les erreurs de modèle et d'analyse sont décorréliées.
- L'opérateur de modèle peut être supposé linéaire, ou linéarisé autour de l'analyse : $M_i(x(t_{i-1})) - M_i(x_a(t_{i-1})) = [M'_i(x_a)](x(t_{i-1}) - x_a(t_{i-1}))$.

6.2. Filtre de Kalman. Sous les hypothèses précédentes, on a le résultat suivant :

Théorème 6.1. *La façon optimale (au sens des moindres carrés) d'assimiler séquentiellement les observations est donnée par le filtre de Kalman (Kalman filter, KF), défini par récurrence sur les instants d'observation t_i :*

- *Étape de prévision* : $x_f(t_i) = M_i x_a(t_{i-1})$
- *Covariance d'erreur de prévision* : $P_i^f = M_i P_{i-1}^a M_i^T + Q_i$
- *Matrice de gain de Kalman* : $K_i = P_i^f H_i^T (H_i P_i^f H_i^T + R_i)^{-1}$
- *Étape d'analyse* : $x_a(t_i) = x_f(t_i) + K_i (y_i - H_i x_f(t_i))$
- *Covariance d'erreur d'analyse* : $P_i^a = (I - K_i H_i) P_i^f$

Démonstration. L'étape de prévision prévoie juste qu'on ne peut utiliser que le modèle pour faire évoluer l'état entre les instants t_{i-1} et t_i , et on le fait en partant du précédent état optimal, à savoir l'analyse $x_a(t_{i-1})$.

On doit ensuite calculer l'erreur de prévision :

$$\begin{aligned} x_f(t_i) - x_t(t_i) &= M_i(x_a(t_{i-1})) - M_i(x_t(t_{i-1})) + M_i(x_t(t_{i-1})) - x_t(t_i) \\ &= M_i(x_a(t_{i-1}) - x_t(t_{i-1})) + M_i(x_t(t_{i-1})) - x_t(t_i) \end{aligned}$$

et l'erreur de prévision se décompose donc comme la somme de l'erreur d'analyse à l'instant t_{i-1} propagée par le modèle M_i à l'instant t_i , et de l'erreur de modèle à l'instant t_i . Par décorrélation des deux erreurs, la covariance d'erreur sera la somme des deux covariances, la deuxième étant la matrice Q_i . Pour la première, on obtient

par définition de la covariance l'espérance de $M_i(x_a(t_{i-1}) - x_t(t_{i-1}))(x_a(t_{i-1}) - x_t(t_{i-1}))^T M_i^T$ qui vaut $M_i P_{i-1}^a M_i^T$.

Enfin, le gain optimal et l'analyse optimale (et sa matrice de covariance d'erreur) sont exactement celles définies par l'analyse moindres carrés (comme tout se passe à un instant fixé, t_i). \square

6.3. Équivalence avec le 4D-VAR. On a le résultat d'équivalence suivant :

Théorème 6.2. *Sur la même période d'assimilation, si on suppose que le modèle est parfait ($Q = 0$), et que les deux algorithmes utilisent les mêmes données (observations, ébauche de la condition initiale, et matrice de covariance d'erreur d'ébauche à l'instant initial), alors il y a égalité entre :*

- (1) l'analyse finale $x_a(t_N)$ produite par le filtre de Kalman, et
- (2) la valeur finale de la trajectoire optimale estimée par le 4D-VAR, c'est-à-dire $M_{0 \rightarrow t_N} x_0^*$.

Il est remarquable de noter qu'on arrive au même résultat alors que les approches sont totalement différentes. Dans un cas, à chaque nouvelle observation, on réalise une analyse optimale (tri-dimensionnelle, sans considération du temps), alors que dans l'autre cas, on cherche un minimum global du problème quadri-dimensionnel (on minimise l'écart global, sur toute la trajectoire en temps).

6.4. Filtre de Kalman étendu. Lorsque le modèle n'est pas linéaire, et/ou que l'opérateur d'observation H n'est pas linéaire, les opérateurs sont linéarisés (ou dérivés) autour de l'état courant, typiquement la dernière analyse ou prévision, et les mêmes formules s'appliquent, avec les opérateurs linéarisés pour la définition de la matrice de gain, et pour la propagation des matrices de covariance.

6.5. Commentaires. Le coût de mise en œuvre du filtre de Kalman (étendu ou non) est essentiellement le coût de calcul de l'analyse et de sa matrice de covariance d'erreur. La propagation de la matrice de covariance requiert n résolution du modèle (linéaire tangent et/ou adjoint), pour propager chacun des n vecteurs-colonnes de l'ancienne matrice. Les coûts de stockage (des matrices de covariance, notamment) et de calcul sont donc largement supérieurs à la mise en œuvre du 4D-VAR, même pour des petits modèles.

De nombreux filtres ont été développés ces dernières années, notamment en utilisant la réduction d'ordre (décomposition des matrices en valeurs singulières : POD, SVD, ...), pour s'affranchir de cette difficulté, et se restreindre (comme dans l'interpolation optimale) à des dimensions plus raisonnables, en ne conservant que des sous-matrices des matrices complètes.

Exemple du filtre SEEK : on suppose que la matrice P_0^a est décomposée sous la forme $S_0^a S_0^{aT}$ où S est une matrice $r \times n$, avec $r \ll n$ (par exemple en tronquant une SVD sur la matrice P). Les formules de mise à jour deviennent :

- Chaque vecteur colonne de S^a est propagé pour en déduire la colonne correspondante de S^f : $[S_i^f]_j = M_i(x_a(t_{i-1}) + [S_{i-1}^a]_j) - M_i(x_a(t_{i-1}))$;
- Matrice de gain : $K_i = S_i^f [I + (H S_i^f)^T R^{-1} (H S_i^f)]^{-1} (H S_i^f)^T R^{-1}$;
- Covariance d'erreur d'analyse : $P_i^a = S_i^f [I + (H S_i^f)^T R^{-1} (H S_i^f)]^{-1} S_i^{fT}$, décomposable sous la forme $S_i^a S_i^{aT}$ avec une SVD de la matrice à l'intérieur du crochet.

Le coût du filtre SEEK devient simplement le coût de propagation des r vecteurs de la décomposition des matrices de covariance d'erreur.

7. ESTIMATION DE PARAMÈTRES DANS UN SYSTÈME D'EDO

On suppose que l'équation d'état (qui modélise l'évolution du système) est un système d'équations différentielles ordinaires (EDO) :

$$\begin{cases} \frac{dy_i}{dt} = f_i(t, y, a), \\ y_i(0) = y_{0i}, \end{cases}$$

pour $i = 1, \dots, N$, et où on note $y = (y_1, \dots, y_N)$ et $a = (a_1, \dots, a_k) \in \mathbb{R}^k$. L'intégration du système d'EDO permet de calculer les solutions $y_i(a, t)$ pour $t \geq 0$.

On suppose qu'on dispose d'observations à certains instants : $y_i(t_j)$, $j = 1, \dots, M$. On note $y_{i,j}^{obs}$ la valeur observée (ou mesurée) de la solution y_i à l'instant t_j . Le but est d'estimer les paramètres a à partir des observations.

La formulation par moindres carrés consiste à définir la fonctionnelle suivante :

$$J(a) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N [y_i(a, t_j) - y_{i,j}^{obs}]^2$$

Le problème d'identification peut ainsi se réécrire sous la forme du problème d'optimisation suivant : on cherche \hat{a} tel que

$$J(\hat{a}) = \inf_{a \in K} J(a)$$

où K est l'ensemble des paramètres a admissibles.

7.1. Cas linéaire. On suppose que les modèles f_i dépendent linéairement des y_j et des paramètres a :

$$f_i(t, y, a) = \sum_{j=1}^N a_{ij} y_j(t),$$

où les a_{ij} sont bornés. On a donc le système suivant :

$$\begin{cases} \frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^N a_{ij} y_j(t), \\ y_i(0) = y_{0i}, \end{cases}$$

qu'on peut réécrire sous forme matricielle :

$$\frac{dY}{dt} = AY, \quad Y(0) = Y_0$$

où la matrice A a pour coefficients les (a_{ij}) .

La solution est donc $Y(t) = e^{At} Y_0$, et Y dépend donc continûment de A . Les a_{ij} étant bornés, on peut supposer que le domaine admissible K est un compact de \mathbb{R}^k . Alors le minimum de J existe, on a existence (mais pas forcément unicité) du jeu de paramètres optimaux.

On doit maintenant calculer le gradient de J par rapport à a .

7.1.1. Méthode directe. On note $\tilde{Y}_{ij} = \frac{\partial Y}{\partial a_{ij}}$ la dérivée de Y par rapport à un des paramètres a_{ij} . Par définition, il s'agit de la limite quand ε tend vers 0 de

$$\frac{Y(A + \varepsilon K_{ij}) - Y(A)}{\varepsilon},$$

où K_{ij} est une matrice de dimension $k \times k$ (comme A), nulle, sauf pour l'élément (i, j) qui vaut 1. On a alors, par linéarité :

$$\frac{dY(A + \varepsilon K_{ij})}{dt} = AY(A + \varepsilon K_{ij}) + \varepsilon K_{ij}Y(A + \varepsilon K_{ij}),$$

et en faisant un développement de Y autour de A , on a

$$Y(A + \varepsilon K_{ij}) = Y(A) + \varepsilon \tilde{Y}_{ij} + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

En substituant cette dernière expression, on obtient

$$\frac{dY(A + \varepsilon K_{ij})}{dt} = AY(A) + \varepsilon A\tilde{Y}_{ij} + \varepsilon K_{ij}Y(A) + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

En soustrayant $\frac{dY(A)}{dt}$, en divisant par ε et en passant à la limite, on obtient l'équation (dite linéaire tangente) pour la dérivée de Y par rapport à a_{ij} :

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{Y}_{ij}}{dt} = A\tilde{Y}_{ij} + K_{ij}Y, \\ \tilde{Y}_{ij}(0) = 0. \end{cases}$$

On peut alors calculer la dérivée de J par rapport au paramètre a_{ij} , et par un calcul similaire, on trouve :

$$\frac{\partial J}{\partial a_{ij}}(a) = \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^N [y_i(a, t_j) - y_{i,j}^{obs}] \times (\tilde{Y}_{ij})_i(a, t_j).$$

Pour calculer la dérivée par rapport à un paramètre a_{ij} , il faut donc résoudre l'équation directe (pour calculer la solution directe Y), et résoudre l'équation linéaire tangente (pour calculer \tilde{Y}_{ij}). Au total, si on veut tout le gradient de la fonction coût, il faut résoudre une fois le problème direct, et N^2 problèmes perturbés (linéaires tangents). Le coût est donc prohibitif, ce qui empêche (sauf cas simplissimes) de calculer le gradient par une approche dite directe.

7.1.2. Méthode adjointe. On note p_i le multiplicateur de Lagrange associé à chaque EDO. On peut alors définir le Lagrangien suivant, correspondant au problème de minimisation de J sous la contrainte de modèle (i.e. que le système d'EDO soit respecté) :

$$\mathcal{L}(a, Y, P) = J(a, Y) + \sum_{i=1}^N \int_0^T \left(P, \frac{dY}{dt} - AY \right) dt.$$

En faisant une intégration par parties, on peut réécrire le lagrangien :

$$\mathcal{L}(a, Y, P) = J(a, Y) + \sum_{i=1}^N \int_0^T \left[- \left(\frac{dP}{dt}, Y \right) - (A^T P, Y) \right] dt + (P(T), Y(T)) - (P(0), Y(0)).$$

Chercher un minimum de $J(a, Y)$ sous la contrainte de modèle revient à chercher un point-selle de \mathcal{L} . Un point-selle $(\hat{a}, \hat{Y}, \hat{P})$ de \mathcal{L} annule les 3 dérivées partielles du lagrangien par rapport à chacune des variables.

Dérivée nulle par rapport à P :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial P} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dY}{dt} = AY.$$

On récupère la contrainte du modèle direct.

Dérivée nulle par rapport à Y :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \tilde{Y}} \cdot \tilde{Y} = 0 = \sum_{j=1}^M [Y(t_j) - Y_j^{obs}] \tilde{Y}(t_j) - \sum_{i=1}^N \left[\int_0^T \frac{dP}{dt} \cdot \tilde{Y} + \int_0^T (A^T P, \tilde{Y}) \right],$$

et $(P(T), \tilde{Y}(T)) = 0$, pour toute perturbation \tilde{Y} . La dérivée nulle pour toute perturbation implique que P est solution de l'équation adjointe :

$$\begin{cases} -\frac{dP}{dt} = A^T P - \sum_{j=1}^M [Y(t_j) - Y_j^{obs}] \delta(t_j), \\ P(T) = 0. \end{cases}$$

P est alors appelé état adjoint.

Dérivée nulle par rapport à a :

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a_{ij}} = 0 = - \int_0^T p_i y_j.$$

Pour calculer le gradient de J , il suffit désormais de résoudre une fois le modèle direct (pour calculer Y), et une fois le modèle adjoint (pour calculer P), qui nécessite le même coût de calcul que le modèle direct.

7.2. Cas général.

$$\begin{cases} \frac{dY}{dt} = f(t, Y(t), a(t)), \\ Y(0) = Y_0, \end{cases}$$

où $Y = (y_1, \dots, y_N)$, et $a(t) \in L^2(0, T)$.

Le but est toujours d'identifier les paramètres a à partir de mesures $y_i(a, t)$, $i = 1, \dots, N$, qu'on note $z_i(t)$.

On va minimiser au sens des moindres carrés la fonction coût suivante :

$$J(a) = \int_0^T \sum_{i=1}^N [y_i(a, t) - z_i(t)]^2,$$

où $z_i(t)$ représente les mesures expérimentales de $y_i(a, t)$.

Il y a deux façons d'identifier a :

- i) $a \in K$ compact de V , espace de dimension finie M . Par exemple un espace de polynômes, ou en utilisant des lois a priori sur les paramètres a . Si le nombre de paramètres est petit, alors le problème est bien posé, mais a est mal identifié car V est probablement trop restrictif par rapport à la réalité. Il faut alors augmenter la dimension M de l'espace V , ce qui revient à augmenter le nombre de paramètres, mais cela conduit généralement à des instabilités numériques.
- ii) $a \in V$ espace de dimension infinie. Les données étant souvent bruitées, cela induit des instabilités sur a , et il faut alors régulariser le problème pour rendre le problème bien posé. On définit alors la fonctionnelle régularisée :

$$J_\varepsilon(a) = J(a) + \varepsilon \|a\|^2.$$

Exemples : $V = L^2(0, T)$, $H^1(0, T)$, $H^2(0, T)$, ... et la norme choisie pour la régularisation dépendra de l'espace considéré.

Formulation Lagrangienne :

$$\mathcal{L}(a, Y, P) = J_\varepsilon(a, Y) + \int_0^T \left(P(t), \frac{dY}{dt} - f(t, Y, a) \right) dt$$

qu'on peut réécrire sous la forme, grâce à une intégration par parties :

$$\mathcal{L}(a, Y, P) = J_\varepsilon(a, Y) - \int_0^T \left(\frac{dP}{dt}, Y \right) dt - \int_0^T (P(t), f(t, Y, a)) dt + (P(T), Y(T)) - (P(0), Y(0)),$$

avec la fonctionnelle régularisée

$$J_\varepsilon(a, Y) = \frac{1}{2} \left[\int_0^T \|Y(t) - Z(t)\|^2 dt + \varepsilon \|a\|^2 \right].$$

Comme précédemment, la minimisation de J_ε sous contrainte de modèle se ramène à la recherche d'un point-selle $(\hat{a}, \hat{Y}, \hat{P})$ du lagrangien \mathcal{L} .

Dérivée nulle par rapport à P : on retrouve l'équation d'état sur Y .

Dérivée nulle par rapport à Y : dans une direction de perturbation ϕ , on obtient

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial Y}(\hat{a}, \hat{Y}, \hat{P}).\phi = 0 \\ & = \int_0^T (\hat{Y} - Z).\phi dt - \int_0^T \left(\frac{d\hat{P}}{dt}, \phi \right) - \int_0^T \left(\hat{P}, \frac{\partial f}{\partial Y} \phi \right) + (\hat{P}(T), \phi(T)), \end{aligned}$$

et donc on obtient l'équation adjointe sur P :

$$\begin{cases} -\frac{d\hat{P}}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial Y} \right)^T \hat{P} - (\hat{Y} - Z), \\ \hat{P}(T) = 0. \end{cases}$$

Dérivée nulle par rapport à a : dans une direction de perturbation b , on trouve

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial a}(\hat{a}, \hat{Y}, \hat{P}).b = 0 \\ & = \varepsilon (\hat{a}, b)_V - \int_0^T \left(\hat{P}, \frac{\partial f}{\partial a} b \right) dt. \end{aligned}$$

Si $V = L^2(0, T)$, alors on peut factoriser :

$$\int_0^T \left[\varepsilon \hat{a}(t) + \left(\frac{\partial f}{\partial a} \right)^T \hat{P} \right] b dt = 0,$$

et comme la dérivée doit être nulle pour toute perturbation b , on obtient la condition d'optimalité suivante :

$$\varepsilon \hat{a}(t) + \left(\frac{\partial f}{\partial a} \right)^T \hat{P} = 0.$$

7.3. Algorithme numérique de résolution du problème d'identification.

7.3.1. *Algorithme de gradient.* On initialise la valeur des paramètres : $a = a^0$. On résout ensuite à l'itération n les deux systèmes direct et adjoint suivants :

$$\begin{cases} \frac{dY^n}{dt} = f(t, Y^n, a^n), \\ Y^n(0) = Y_0, \end{cases}$$

$$\begin{cases} -\frac{dP^n}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial Y}(t, Y^n, a^n) \right)^T P^n - (Y^n - Z) \\ P^n(T) = 0, \end{cases}$$

et on définit le nouvel itéré :

$$a^{n+1} = a^n - \rho^n \left(\frac{\partial f}{\partial a}(t, Y^n, a^n) \right)^T P^n,$$

où ρ^n est le pas de descente. On peut choisir $\rho^n = \rho > 0$ suffisamment petit, pour garantir la descente (gradient à pas fixe), ou déterminer le pas optimal (gradient à pas optimal) : si $Y(\rho^n)$ est solution du problème suivant

$$\begin{cases} \frac{dY(\rho^n)}{dt} = f(t, Y(\rho^n), a^n - \rho^n J^n), \\ Y(\rho^n)(0) = Y_0, \end{cases}$$

alors le pas optimal est solution du problème d'optimisation suivant :

$$J(\rho) = \inf_{\rho^n > 0} \|Y(\rho^n) - Z\|^2.$$

Le problème de la recherche du pas optimal ρ peut s'avérer délicat, la minimisation pouvant converger vers un minimum local.

7.3.2. *Méthode de quasi-linéarisation.* On linéarise l'équation par rapport à Y et a pour se ramener à une situation linéaire. Alors, à l'itération n , on doit résoudre le problème direct suivant, linéarisé autour de l'état Y^n :

$$\begin{cases} \frac{d\tilde{Y}}{dt} = f(t, Y^n, a^n) + \left(\frac{\partial f}{\partial Y}(t, Y^n, a^n) \right) (\tilde{Y} - Y^n) + \left(\frac{\partial f}{\partial a}(t, Y^n, a^n) \right) (\tilde{a} - a^n), \\ \tilde{Y}(0) = Y_0. \end{cases}$$

On voit que \tilde{Y} dépend de \tilde{a} de façon affine. On peut alors chercher à minimiser la fonction coût suivante :

$$J(\tilde{a}) = \frac{1}{2} \|\tilde{Y}(\tilde{a}) - Z\|^2,$$

et on cherche le nouvel itéré a^{n+1} tel que

$$J(a^{n+1}) = \inf_{\tilde{a}} J(\tilde{a}).$$

Ce problème est linéaire quadratique, et donc facile à résoudre.

Le problème adjoint à l'étape n est le suivant :

$$\begin{cases} -\frac{dP^n}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial Y}(t, Y^n, a^n) \right)^T P^n - (Y^n - Z) \\ P^n(T) = 0, \end{cases}$$

et le gradient de la fonction coût s'écrit alors :

$$\nabla J(\tilde{a}) = \left(\frac{\partial f}{\partial a}(t, Y^n, a^n) \right)^T P^n.$$

On utilise alors, par exemple, une méthode de gradient conjugué pour la mise à jour des paramètres : $a_{j+1}^n = a_j^n - \rho_j^n w_j^n$, avec $w_{j+1}^n = J'(a_j^n) + \lambda_j^n w_j^n$, de sorte que $(\hat{Y}(a_{j+1}^n), \hat{Y}(a_j^n)) = 0$, avec

$$\begin{cases} \frac{d\hat{Y}}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial Y}(t, Y^n, a^n) \right) \hat{Y} + \left(\frac{\partial f}{\partial a}(t, Y^n, a^n) \right) \hat{a}, \\ \hat{Y}(0) = 0. \end{cases}$$

Il faut alors boucler, en faisant des itérations externes de linéarisation, et dans ces boucles, faire des itérations internes de gradient conjugué. La convergence est rapide s'il y a peu de paramètres.

7.3.3. Problèmes liés à la discrétisation spatiale. Il faut faire attention que la discrétisation spatiale et le fait de prendre l'adjoint ne sont pas des opérations qui commutent. Il est impératif de prendre l'adjoint du modèle discrétisé, pour obtenir le modèle adjoint discrétisé, qui sera cohérent avec le modèle direct, et qui donnera la valeur exacte du gradient de la fonctionnelle correspondante.

Exemple simple : si on utilise comme discrétisation d'une dérivée d'ordre un en espace avec un schéma à 2 points décentré à droite :

$$\left(\frac{\partial Y}{\partial x} \right)_i \simeq \frac{Y_{i+1} - Y_i}{\Delta x},$$

alors le produit scalaire avec la variable adjointe $(P)_i$ va donner une intégrale discrète, c'est-à-dire une somme :

$$\sum_i P_i \frac{Y_{i+1} - Y_i}{\Delta x}$$

qu'on peut réécrire avec une intégration par parties discrète (i.e. une inversion d'indices) :

$$\frac{1}{\Delta x} \left(\sum_i P_i Y_{i+1} - \sum_i P_i Y_i \right) = \frac{1}{\Delta x} \left(\sum_i P_{i-1} Y_i - \sum_i P_i Y_i \right) = \sum_i -\frac{P_i - P_{i-1}}{\Delta x} Y_i,$$

en ne tenant pas compte ici des termes de bord dans la somme. Et on constate que cela n'est pas équivalent à la discrétisation (avec le même schéma qu'au départ, à savoir un schéma décentré à droite) de l'adjoint de l'opérateur continu, qui est l'opposé de la dérivée. En effet, on obtient l'opposé de la dérivée spatiale, mais avec une discrétisation par un schéma à deux points, décentré à gauche.

Cela peut aussi se comprendre d'un point de vue matriciel : la transposée de l'opérateur dérivée première discrétisée par un schéma décentré à droite est

$$\begin{pmatrix} \frac{-1}{\Delta x} & \frac{+1}{\Delta x} & 0 & \dots \\ 0 & \frac{-1}{\Delta x} & \frac{+1}{\Delta x} & 0 \\ & & \ddots & \\ \dots & 0 & 0 & \frac{-1}{\Delta x} \end{pmatrix}^T = - \begin{pmatrix} \frac{+1}{\Delta x} & 0 & 0 & \dots \\ \frac{-1}{\Delta x} & \frac{+1}{\Delta x} & 0 & 0 \\ & & \ddots & \\ \dots & 0 & \frac{-1}{\Delta x} & \frac{+1}{\Delta x} \end{pmatrix}$$

et donc l'adjoint de la dérivée discrète décentrée à droite est l'opposé de la dérivée discrète **décentrée à gauche**, et non à droite. Pour éviter ce genre de désagréments (l'utilisation du mauvais schéma entraînant un calcul faux du gradient par l'adjoint, puisque ce n'est plus l'adjoint du système discrétisé), il est possible d'utiliser des schémas symétriques (ou centrés).

8. APPLICATION À UN SYSTÈME MÉTÉO/OCÉANO SIMPLE

8.1. **Équation de Burgers.** Nous prenons tout d'abord l'exemple des équations de Burgers, qui peuvent être vues comme le résultat d'une intégration verticale des équations de la dynamique des fluides, puis d'une moyenne (ou intégration) horizontale le long des méridiens de la Terre, pour se ramener à une équation 1D, qui modélise (de façon très simpliste) un écoulement le long d'un parallèle de la Terre (typiquement le parallèle 45° Nord).

L'équation s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0,$$

où u est la fonction de courant, et ν est la diffusion.

On suppose que u est observé partout et tout le temps, pour simplifier les calculs. Et on a donc accès à une fonction u_{obs} . La fonction coût est la suivante :

$$J(u_0) = \frac{1}{2} \int_0^T (u - u_{obs})^2 dt,$$

et on souhaite la minimiser pour identifier la meilleure condition initiale possible. On ne tient pas compte ici du terme de rappel à l'ébauche (qui permet notamment de régulariser le problème d'optimisation), son gradient ne posant aucune difficulté.

Si on perturbe la trajectoire u dans la direction \bar{u} , on obtient l'équation linéaire tangente suivante :

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial u}{\partial x} + u \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} - \nu \frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial x^2} = 0,$$

ce qui peut s'écrire sous la forme

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} = A \bar{u},$$

où A représente l'opérateur linéaire suivant :

$$A = -\frac{\partial u}{\partial x} - u \frac{\partial}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Le modèle adjoint est alors obtenu en transposant cet opérateur :

$$A^T = -\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial(u \cdot)}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

En effet, si on applique le premier terme de l'opérateur A à une fonction test f , et qu'on en prend le produit scalaire avec une fonction g , on trouve

$$\int_{\Omega} \left(-\frac{\partial u}{\partial x} f \right) g = \int_{\Omega} \left(-\frac{\partial u}{\partial x} g \right) f$$

et donc l'opérateur est auto-adjoint. Si on fait de même avec le second terme de A , on a, en faisant une intégration par parties (et en négligeant les termes de bord, absents sur un domaine périodique) :

$$\int_{\Omega} \left(-u \frac{\partial f}{\partial x} \right) g = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial(ug)}{\partial x} \right) f,$$

et l'opérateur adjoint est donc $\frac{\partial(u \cdot)}{\partial x}$. Et le dernier terme est auto-adjoint, avec deux intégrations par parties (qui ne changent donc pas le signe).

Donc en appliquant cet opérateur à la variable adjointe p , on obtient :

$$A^T p = -p \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial(Up)}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} = u \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 p}{\partial x^2},$$

et on en déduit le modèle adjoint :

$$-\frac{\partial p}{\partial t} = u \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - (u - u_{obs}),$$

avec une condition finale $p(T) = 0$ (attention, ne pas oublier dans le second membre le terme de forçage par la dérivée de la fonction coût par rapport à la trajectoire u).

Le gradient de la fonction coût est alors

$$\nabla J(u_0) = -p(0).$$

8.2. Équations de Saint-Venant. Nous prenons maintenant l'exemple du modèle shallow water, ou équations de Saint-Venant. Ces équations sont utilisées pour décrire l'évolution d'un fluide incompressible, pour lequel la hauteur caractéristique de l'eau est petite par rapport aux dimensions horizontales. Les équations générales de la dynamique des fluides géophysiques sont intégrées verticalement, sous l'hypothèse hydrostatique (équilibre du gradient vertical de pression avec la gravité), négligeant ainsi l'accélération verticale. Les équations de Saint-Venant sont :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - fv + \frac{\partial \phi}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + fu + \frac{\partial \phi}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial u \phi}{\partial x} + \frac{\partial v \phi}{\partial y} &= 0, \end{aligned}$$

où u et v sont les composantes horizontales de la vitesse, et ϕ est le géopotentiel (proportionnel à la hauteur de la surface libre). Les paramètres se réduisent ici à f , la force de Coriolis.

On suppose (pour simplifier les écritures) que u , v et ϕ sont observés à chaque instant et partout, et on dispose donc des données u_{obs} , v_{obs} et ϕ_{obs} . Le but est de retrouver la condition initiale $X_0 = (u_0, v_0, \phi_0)$ du système grâce aux observations. On ne tient pas compte ici du terme de rappel à l'ébauche, et on considère la fonction coût suivante :

$$J(X_0) = \frac{1}{2} \int_0^T [(u - u_{obs})^2 + (v - v_{obs})^2 + \alpha(\phi - \phi_{obs})^2] dt,$$

où α est un coefficient de pondération entre les écarts quadratiques sur la vitesse et sur le géopotentiel.

Si on linéarise le modèle autour de la trajectoire de référence (u, v, ϕ) , le modèle linéaire tangent (dont les variables sont notées $(\bar{u}, \bar{v}, \bar{\phi})$) est (aux erreurs de calcul près) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \bar{v} \frac{\partial u}{\partial y} - f \bar{v} + \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} &= 0 \\ \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + u \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \bar{v} \frac{\partial v}{\partial y} + f \bar{u} + \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u} \phi}{\partial x} + \frac{\partial u \bar{\phi}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v} \phi}{\partial y} + \frac{\partial v \bar{\phi}}{\partial y} &= 0. \end{aligned}$$

On peut alors écrire ce système sous forme matricielle :

$$\frac{\partial \bar{X}}{\partial t} = A \bar{X},$$

où $\bar{X} = (\bar{u}, \bar{v}, \bar{\phi})$ est la variable d'état du modèle linéaire tangent, est A est la matrice suivante :

$$F = \begin{pmatrix} -u \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial}{\partial y} & -\frac{\partial u}{\partial y} + f & -\frac{\partial}{\partial x} \\ -\frac{\partial v}{\partial x} - f & -u \frac{\partial}{\partial x} - v \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial y} & -\frac{\partial}{\partial y} \\ -\frac{\partial \phi}{\partial x} - \phi \frac{\partial}{\partial x} & -\frac{\partial \phi}{\partial y} - \phi \frac{\partial}{\partial y} & -\frac{\partial u}{\partial x} - u \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} - v \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix}.$$

Le modèle adjoint est obtenu par transposition de cette matrice :

$$-\frac{\partial P}{\partial t} = A^T P - \frac{\partial J}{\partial \bar{X}},$$

ce qui donne (aux erreurs de calcul près), après transposition de la matrice F (donc échange des lignes et colonnes) **ET** des opérateurs de dérivation (voir le 1er paragraphe pour un détail du calcul de l'adjoint de chaque terme) :

$$\begin{aligned} -\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} - u \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \frac{\partial (v \tilde{u})}{\partial y} + \tilde{v} \frac{\partial v}{\partial x} + f \tilde{v} - \phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x} &= -(u - u_{obs}) \\ -\frac{\partial \tilde{v}}{\partial t} + \tilde{u} \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial (u \tilde{v})}{\partial x} - v \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} - f \tilde{u} - \phi \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial y} &= -(v - v_{obs}) \\ -\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial t} - \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} - u \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x} - v \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial y} &= -\gamma(\phi - \phi_{obs}). \end{aligned}$$

Le système adjoint est résolu de façon rétrograde en temps, avec la condition finale $\tilde{u}(T) = 0$, $\tilde{v}(T) = 0$ et $\tilde{\phi}(T) = 0$. Et alors le gradient de la fonction coût est donné par :

$$\nabla J(U_0) = -P(0) = - \begin{pmatrix} \tilde{u}(0) \\ \tilde{v}(0) \\ \tilde{\phi}(0) \end{pmatrix}.$$