arXiv:2305.02896v1 [stat.AP] 4 May 2023

通过线搜索优化实现非线性资料同化的无伴随4D-Var方法

Elias D. Nino-Ruiz*[1] 和 J. Diaz-Rodriguez†[2]

[1]哥伦比亚北方大学计算机科学系应用数学与计算机科学实验室[2]加拿大约克大学数学与统计学系

2023年5月5日

摘要

本文提出了两种实用的四维变分（4D-Var）集合卡尔曼滤波（4D-EnKF）方法，用于非线性资料同化。我们提出的公式的核心思想是，避免 4D-Var 优化中对伴随模型的固有需求，更重要的是，在同化观测时处理非线性观测算子。所提出的方法如下：在观测时刻获取模型实现集合的快照，并利用这些快照构建控制空间，以估计分析增量。通过在观测时刻对观测算子进行线性化，提出一种基于线搜索的优化方法来估计最优分析增量。理论上证明，只要控制空间的维数与模型维数相同，该方法就会收敛。在第一种公式中，通过 Bickel 和 Levina 精度矩阵估计器，对背景误差协方差矩阵进行满秩平方根近似，以此构建控制空间。在此背景下，我们提出一种迭代 Woodbury 矩阵公式，以高效执行优化步骤。最后一种公式可视为最大似然集合滤波器在 4D-Var 框架下的扩展。该方法利用先验误差协方差矩阵的伪平方根近似来构建控制空间。实验采用 Lorenz 96 模型进行。结果表明，就均方根误差值而言，两种方法都能在 4D-Var 优化问题中合理估计后验误差模态。此外，随着集合规模增大，所提出的滤波器实现的精度也会提高。

*电子邮箱地址： enino@uninorte.edu.co；通讯作者
†电子邮箱： jdiazrod@yorku.ca

1 引言

简而言之，资料同化（DA）的目标是利用含有真实噪声的观测 $\{\mathbf{y}_k\}_{k=0}^{M}$ [21, 24, 41]，校正不完美的模型轨迹 $\{\mathbf{x}_k^b\}_{k=0}^{M}$；其中，$\mathbf{x}_k^b \in \mathbb{R}^{n\times 1}$ 是众所周知的预报状态，k 表示收集观测的时间索引，$0 \le k \le M$、n 表示状态规模，同化窗口的大小为 M，$\mathbf{y}_k \in \mathbb{R}^{m\times 1}$ 是观测向量，m 是观测数量。预报通常由数值模型生成，这些模型用于模拟海洋和/或大气的行为:

$$\mathbf{x}_k = \mathcal{M}_{t_{k-1}\to t_k}\left(\mathbf{x}_{k-1}\right) \quad \text{for } 0 \le k-1 \le M, \text{ and } \mathbf{x}_k \in \mathbb{R}^{n\times 1}, \tag{1}$$

其中，$\mathcal{M}:\ \mathbb{R}^{n\times 1} \to \mathbb{R}^{n\times 1}$ 是非线性模型算子（通常以偏微分方程和常微分方程的形式给出）。在四维变分（4D-Var）资料同化方法中，[20],考虑如下形式的代价函数 [48, 49]:

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}\cdot\left\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_0^b\right\|^2_{\mathbf{B}_0^{-1}} + \frac{1}{2}\cdot\sum_{k=0}^{M-1}\left\|\mathbf{y}_k - \mathcal{H}_k\left(\mathbf{x}_k\right)\right\|^2_{\mathbf{R}_k^{-1}}, \tag{2}$$

这些方法用于估计初始状态 $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^{n\times 1}$，使其在给定的同化窗口 $\{\mathbf{y}_k\}_{k=0}^{M}$内达到最佳拟合。待求解的优化问题为:

$$\mathbf{x}_0^a = \arg\min_{\mathbf{x}_0}\mathcal{J}\left(\mathbf{x}_0\right), \text{subject to } \mathbf{x}_k = \mathcal{M}_{t_{k-1}\to t_k}\left(\mathbf{x}_{k-1}\right). \tag{3}$$

基于 4D-Var 的方法的一个潜在缺点是需要使用伴随模型。实际上，开发这些模型可能耗费大量人力，运行时的计算成本也很高 [43]。因此，在 4D-Var 业务场景下，可以采用集合方法来避免使用伴随模型 [17, 32]。这些方法的核心思想是构建集合子空间，在其中估计分析增量 [53]。对于非线性观测算子，背景误差的底层误差分布可能是非高斯的，因此无法获得计算式（3）中后验众数的闭式表达 [1, 48]。因此，可以采用信赖域[33] 和线搜索 [34] 等迭代方法，估计式（2）中隐式误差分布的后验众数。我们认为，可以通过控制空间近似（即基于集合）推导出一种基于线搜索的优化方法来求解式（3）。这样一来，模型实现集合不仅可以用于捕捉所有观测时刻的误差动力学，还可以构建用于估计分析增量的空间。简单的集合异常可通过修正Cholesky分解来张成控制空间，或构造背景误差协方差矩阵的稳健平方根近似 [3, 42]。对于后一种估计器，其特殊结构可支持无矩阵4D-EnKF实现。

本文结构如下：第 2 节简要讨论线性和非线性情况下变分与集合资料同化方法的理论和实践方面。第 4 节通过线搜索优化提出了两种高效的 4D-EnKF 公式实现，

第一种方法利用修正Cholesky分解构建控制空间，而最后一种方法使用集合扰动估计后验增量。文中还详细介绍了它们的计算成本，以及基于线搜索的优化方法的收敛性。在第 5 节中，我们进行了实验测试，以评估所提出的滤波器实现的准确性，并采用 Lorenz 96 模型作为实验的替代模型。本研究的结论将在第 6 节中阐述。

2 预备知识

本节讨论一些与开发我们的变分滤波器相关的主题。

3 集合卡尔曼滤波

集合卡尔曼滤波（EnKF） [29, 9] 是一种基于集合的序贯方法，它利用一组模型实现来估计先验误差分布 [19, 47]的矩：

$$\mathbf{X}_k^b = \left[\mathbf{x}_k^{b[1]}, \mathbf{x}_k^{b[2]}, \ldots, \mathbf{x}_k^{b[N]}\right] \in \mathbb{R}^{n\times N}\,, \tag{4}$$

其中，$\mathbf{x}_k^{b[e]} \in \mathbb{R}^{n\times 1}$ 表示在时间k、 $0 \le k \le M$条件下的第 e 个集合成员，$1 \le e \le N$。利用（4）的经验矩来估计预报状态 $\mathbf{x}_k^b$:

$$\overline{\mathbf{x}}_k^b = \frac{1}{N}\cdot\sum_{e=1}^{N}\mathbf{x}_k^{b[e]} \in \mathbb{R}^{n\times 1}\,, \tag{5}$$

以及背景误差协方差矩阵 B:

$$\mathbf{P}_k^b = \frac{1}{N-1}\cdot\mathbf{\Delta X}_k^b\cdot\left[\mathbf{\Delta X}_k^b\right]^T \in \mathbb{R}^{n\times n}\,, \tag{6}$$

其中，成员偏差矩阵为:

$$\mathbf{\Delta X}_k^b = \mathbf{X}_k^b - \overline{\mathbf{x}}_k^b\cdot\mathbf{1}^T \in \mathbb{R}^{n\times N}\,. \tag{7}$$

随后即可利用合成观测构建后验集合:

$$\mathbf{X}_k^a = \mathbf{X}_k^b + \mathbf{\Delta X}_k^a\,, \tag{8}$$

其中，分析更新可通过求解以下线性系统获得:

$$\left[\left[\mathbf{P}_k^b\right]^{-1} + \mathbf{H}_k^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{H}_k\right]\cdot\mathbf{\Delta X}_k^a = \mathbf{H}_k^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{D}_k^s \in \mathbb{R}^{n\times N}\,, \tag{9}$$

创新矩阵记为 $\mathbf{D}_k^s \in \mathbb{R}^{m\times N}$，其第 e 列 $\mathbf{y}_k - \mathbf{H}_k \cdot \mathbf{x}_k^{b[e]} + \boldsymbol{\varepsilon}_k^{[e]} \in \mathbb{R}^{m\times 1}$ 是一个合成观测，其 $\boldsymbol{\varepsilon}_k^{[e]} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}_m, \mathbf{R}_k)$。在业务数据同化场景中，集合规模可能比模型维度小几个数量级，因此抽样误差会影响分析增量的质量。为抵消抽样噪声的影响，通常采用局地化方法 [13, 5]。在协方差渐消的背景下，可利用空间前驱概念获得精度矩阵的稀疏估计量 [25]。模型分量 i 的前驱（下文记作 $P(i, r)$）对于 $1 \le i \le n$ 和影响半径 $r \in \mathbb{Z}^+$，是指标签小于第 i 个分量标签的所有分量构成的集合。

在基于修正Cholesky分解的集合卡尔曼滤波（EnKF-MC） [37,38] 中，采用以下估计器来近似背景误差分布 [4]的精度协方差矩阵：

$$\widehat{\mathbf{B}}_k^{-1} = \widehat{\mathbf{L}}_k^T \cdot \widehat{\mathbf{D}}_k^{-1} \cdot \widehat{\mathbf{L}}_k \in \mathbb{R}^{n\times n}, \tag{10}$$

其中 Cholesky因子 $\mathbf{L}_k \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 是一个下三角矩阵，

$$\left\{\widehat{\mathbf{L}}_k\right\}_{i,v} = \begin{cases} -\beta_{i,v,k} & , v \in P(i,r) \\ 1 & , i = v \\ 0 & , otherwise \end{cases}, \tag{11}$$

其非零次对角元素 $\beta_{i,v,k}$ 通过拟合如下形式的模型获得，

$$\mathbf{x}_{[i]_k}^T = \sum_{v\in P(i,\,r)} \beta_{i,v,k} \cdot \mathbf{x}_{[v]_k}^T + \boldsymbol{\gamma}_{ik} \in \mathbb{R}^{N\times 1},\ 1 \le i \le n, \tag{12}$$

其中，\(\mathbf{x}_{[i]_k}^T \in \mathbb{R}^{N\times 1}\) 表示集合 (4) 的第 \(v2\) 行（模型分量），向量 \(v3\) 的各分量是来自方差 \(v4\) 未知的零均值正态分布的样本，而 \(\mathbf{D}_k \in \mathbb{R}^{n\times n}\) 是一个对角矩阵，其对角元素为，

$$\{\mathbf{D}_k\}_{i,i} = \widehat{\mathbf{var}}\left(\mathbf{x}_{[i]_k}^T - \sum_{v\in P(i,\,r)} \beta_{i,v,k} \cdot \mathbf{x}_{[j]_k}^T\right)^{-1} \tag{13}$$

$$\approx \mathbf{var}\left(\boldsymbol{\gamma}_{ik}\right)^{-1} = \frac{1}{\sigma_k^2} > 0, \text{ with } \{\mathbf{D}_k\}_{1,1} = \widehat{\mathbf{var}}\left(\mathbf{x}_{[1]_k}^T\right)^{-1}, \tag{14}$$

其中，var(•) 和 $\widehat{\ }$var(•) 分别表示实际方差和经验方差。然后，分析方程可以按照 [38] 中所述的方式写出。

3.1 最大似然集合滤波器

在集合卡尔曼滤波的背景下，滤波器的推导基于先验误差和观测误差均服从高斯分布这一假设。然而，对于非线性观测

算子（即卫星辐射所携带的信息），观测误差不再服从高斯分布，因此，基于集合卡尔曼滤波的方法可能无法获得合理的后验误差分布估计。最大似然集合滤波器（MLEF） [56] 是一种用于最小化三维变分（3D-Var）代价函数的数值方法：

$$\mathcal{J}(\mathbf{x}_k) = \frac{1}{2} \cdot \left\| \mathbf{x}_k - \overline{\mathbf{x}}_k^b \right\|_{\mathbf{B}_k^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \cdot \left\| \mathbf{y}_k - \mathcal{H}_k\left(\mathbf{x}_k\right) \right\|_{\mathbf{R}_k^{-1}}^2 , \tag{15}$$

投影到集合空间。为此，分析增量被限制在由集合扰动（7）张成的空间内，即：

$$\mathbf{x}_k = \overline{\mathbf{x}}_k^b + \mathbf{\Delta X}_k \cdot \mathbf{w} , \tag{16}$$

从而得到如下形式的代价函数：

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\overline{\mathbf{x}}_k^b + \mathbf{\Delta X}_k \cdot \mathbf{w}) &= \frac{N-1}{2} \cdot \|\mathbf{w}\|^2 \\ &+ \frac{1}{2} \cdot \left\| \mathbf{y}_k - \mathcal{H}_k\left(\overline{\mathbf{x}}_k^b + \mathbf{\Delta X}_k \cdot \mathbf{w}\right) \right\|_{\mathbf{R}_k^{-1}}^2 , \end{aligned} \tag{17}$$

及相应的优化问题：

$$\mathbf{w}^* = \arg\min_{\mathbf{w}} \mathcal{J}(\overline{\mathbf{x}}_k^b + \mathbf{\Delta X}_k \cdot \mathbf{w}) . \tag{18}$$

需要注意的是，由于所有计算均在集合空间中进行，因此 MLEF 的计算开销变为：

$$\mathcal{O}\left(N^3 + n \cdot m \cdot N\right) , \tag{19}$$

一旦所有分析增量都映射回模式空间（并围绕估计的后验众数构建后验集合），该过程相对于模型维度是线性的。

3.2 四维变分集合卡尔曼滤波器

在四维变分集合卡尔曼滤波器（4D-EnKF）方法中[27, 30], ，式 (3) 中的模式轨迹被约束在背景集合成员张成的空间内，即：

$$\mathbf{x}_k = \overline{\mathbf{x}}_k^b + \mathbf{\Delta X}_k \cdot \mathbf{w} , \tag{20}$$

其中 $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ 是一个将在稍后确定的冗余坐标向量。假设所有误差源均服从高斯分布（即观测算子是线性的），并将（20）代入方程（2），可得：

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathbf{x}_0) &= \mathcal{J}\left(\overline{\mathbf{x}}_0^b + \mathbf{\Delta X}_0 \cdot \mathbf{w}\right) \\ &= \widehat{\mathcal{J}}(\mathbf{w}) = \frac{(N-1)}{2} \cdot \|\mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{2} \cdot \sum_{k=0}^{M} \|\mathbf{d}_k - \mathbf{Q}_k \cdot \mathbf{w}\|_{\mathbf{R}_k^{-1}}^2 , \end{aligned} \tag{21}$$

其中，$\mathsf{d}_k = \mathsf{y}_k - \mathsf{H}_k \cdot \overline{\mathbf{x}}_k^b \in \mathbb{R}^{m\times 1}$是新息向量，$\mathsf{Q}_k = \mathsf{H}_k \cdot \mathbf{\Delta X}_k^b \in \mathbb{R}^{m\times N}$。随后，通过求取控制变量 w 的最优值来估计初始分析状态：

$$\mathbf{w}^* = \arg\min_{\mathbf{w}} \widehat{\mathcal{J}}(\mathbf{w})\,. \tag{22}$$

(21) 的梯度为：

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{w}}\widehat{\mathcal{J}}(\mathbf{w}) &= (N-1)\cdot\mathbf{w} - \sum_{k=0}^{M}\mathbf{Q}_k^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot[\mathbf{d}_k - \mathbf{Q}_k\cdot\mathbf{w}] \\ &= \left[(N-1)\cdot\mathbf{I} + \sum_{k=0}^{M}\mathbf{Q}_k^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{Q}_k\right]\cdot\mathbf{w} \\ &- \sum_{k=0}^{M}\mathbf{Q}_k^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{d}_k \in \mathbb{R}^{N\times 1}\,,\end{aligned} \tag{23}$$

令该梯度为零，可得最优权重 (22)：

$$\mathbf{w}^* = \left[(N-1)\cdot\mathbf{I} + \sum_{k=0}^{M}\mathbf{Q}_k^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{Q}_k\right]^{-1}\cdot\sum_{k=0}^{M}\mathbf{Q}_k^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{d}_k \in \mathbb{R}^{N\times 1}\,, \tag{24}$$

由此可以估计初始分析状态：

$$\overline{\mathbf{x}}_0^a = \overline{\mathbf{x}}_0^b + \mathbf{\Delta X}_0^b\cdot\mathbf{w}^*\,. \tag{25}$$

与 MLEF 方法类似，基于 4D-EnKF 的方法所需的计算量随模型维数线性增长；显然，所有计算都在集合空间中进行。需要注意的是，在这种表述下，当观测算子为非线性时，后验估计可能会与实际状态存在较大偏差。

3.3 数值优化

在数值优化中，[52, 54], 通常，以下形式的问题：

$$\mathbf{x} = \arg\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})\,,$$

其中，$f(\mathbf{x})$：$\mathbb{R}^{n\times 1}\to\mathbb{R}$ 是一个光滑函数，可通过迭代方案等方法求解，例如

$$\mathbf{x}^{(u+1)} = \mathbf{x}^{(u)} + \mathbf{\Delta x}^{(u)}\,, \tag{26}$$

其中，$\mathbf{\Delta x}^{(u)}$ 是一个搜索方向，例如最速下降方向[44, 16, 11, 26] 牛顿步 [2, 15, 40], 或拟牛顿方法[45, 39, 28]。关于牛顿类方法的简明综述可参阅[23]。由于最速下降方向的步长可能过大，因此线搜索

[14, 50, 18] 或信赖域 [6, 33, 7] 方法可以有效用于最优选择步长，从而确保迭代点全局收敛至驻点。只要关于函数、梯度以及（可能还包括）海森矩阵的某些假设得到满足，这一点便成立 [46]。在线搜索的背景下，通常作出以下假设：

1. 函数 $f(\mathbf{x})$ 在 $\Omega_0 = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n\times 1}, f(\mathbf{x}) \leq f(\mathbf{x}_0)\}$ 上有下界，其中 $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^{n\times 1}$ 可用。

2. 梯度 $\nabla f(\mathbf{x})$ 在包含 Ω_0, 的开凸集 B 中是利普希茨连续的。

$$\|\nabla f(\mathbf{x}) - \nabla f(\mathbf{z})\| \leq L \cdot \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|, \text{ for } \mathbf{x}, \mathbf{z} \in B, \text{ and } L > 0.$$

这些与以下形式的迭代结果共同构成，

$$\mathbf{x}^{(u+1)} = \mathbf{x}^{(u)} + \alpha \cdot \mathbf{\Delta x}^{(u)}, \tag{27}$$

确保全局收敛，只要 [55] α 被选为一个（近似）极小化解即可。

$$\alpha^* = \arg\min_{\alpha \geq 0} f\left(\mathbf{x}^{(u)} + \alpha \cdot \mathbf{\Delta x}^{(u)}\right). \tag{28}$$

4 提出的方法

在本节中，我们将通过修正Cholesky分解，为非线性观测算子开发一种高效且实用的 4D-集合卡尔曼滤波方法实现。

4.1 滤波器推导

我们的主要目标是找到一个初始分析集合 $\mathbf{X}_0^a \in \mathbb{R}^{n\times N}$，使其模型轨迹能够反映给定同化窗口内观测所提供的信息。为此，我们按如下步骤进行：给定一个包含 M 个观测的同化窗口（不失一般性地假设观测在时间上均匀分布），利用数值模型 (1)，将初始背景集合 $\mathbf{X}_0^b$ 向前传播，并在观测时刻对其时间演化进行采样。对于 $0 \leq k \leq M$，将有观测的第 k 步记为 k；在每个观测时刻，可利用背景集合 (4)，通过修正Cholesky分解 (10) 估计精度协方差矩阵 $\mathbf{B}_k^{-1}$ 的满秩平方根近似：

$$\widehat{\mathbf{B}}_k^{-1/2} = \widehat{\mathbf{L}}_k^T \cdot \widehat{\mathbf{D}}_k^{-1/2} \in \mathbb{R}^{n\times n}. \tag{29}$$

随后可利用这种平方根估计构建一个控制空间，以便在其中估计分析增量：

$$\mathbf{x}_k - \overline{\mathbf{x}}_k^b \in \mathbf{range}\left\{\widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\right\},$$

或者等价地:

$$\mathbf{x}_k = \overline{\mathbf{x}}_k^b + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{n\times 1}\,, \tag{30}$$

其中，$\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{n\times 1}$ 是一个冗余坐标向量，其具体形式将在后文确定。由于投影到控制空间上的背景误差协方差矩阵（30）实际上就是单位矩阵，因此先验权重 $\boldsymbol{\alpha}^b$ 满足以下误差统计特性:

$$\boldsymbol{\alpha}^b \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \mathbf{I}\right)\,.$$

因此，定义在空间 (30) 上的 4D-Var 代价函数 (2) 可写为如下形式:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}\left(\mathbf{x}_0\right) &= \mathcal{J}\left(\overline{\mathbf{x}}_0^b + \widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}\right) = \frac{1}{2}\cdot\left\|\boldsymbol{\alpha}\right\|^2 \\ &+ \frac{1}{2}\cdot\sum_{k=0}^{M}\left\|\mathbf{y}_k - \mathcal{H}_k\left(\overline{\mathbf{x}}_k^b + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}\right)\right\|_{\mathbf{R}_k^{-1}}^2\,, \end{aligned} \tag{31}$$

待求解的无伴随优化问题如下:

$$\boldsymbol{\alpha}^a = \arg\min_{\boldsymbol{\alpha}} \mathcal{J}\left(\overline{\mathbf{x}}_0^b + \widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}\right)\,. \tag{32}$$

下一节将介绍一种用于求解优化问题（32）的线搜索方法。

4.2 通过修正Cholesky分解实现的无伴随4D-Var方法（4D-Var-MC）

为了近似求解式（32），我们提出采用如下形式的迭代序列:

$$\mathbf{x}_k^{(u+1)} = \mathbf{x}_k^{(u)} + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u\,,\ \text{for}\ 0\le u\le U\,, \tag{33}$$

其中，u 表示迭代步，U 表示迭代次数，$\boldsymbol{\alpha}_u \in \mathbb{R}^{n\times 1}$ 是一个冗余坐标向量，其具体形式将在后文确定。背景轨迹被设定为初始解 $\mathbf{x}_k^{(0)} = \mathbf{x}_k^b$，对于 $0\le k\le M-1$，因此 $\boldsymbol{\alpha}_0 = \mathbf{0}$。注意，在任意迭代 u 处,

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_k^{(u+1)} &= \mathbf{x}_k^{(0)} + \sum_{v=0}^{u}\widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_v = \overline{\mathbf{x}}_k^b + \sum_{v=0}^{u-1}\widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_v + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u \\ &= \overline{\mathbf{x}}_k^b + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\left[\sum_{v=0}^{u-1}\boldsymbol{\alpha}_v + \boldsymbol{\alpha}_u\right] = \overline{\mathbf{x}}_k^b + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\left[\boldsymbol{\beta}_u + \boldsymbol{\alpha}_u\right] \end{aligned} \tag{34}$$

其中，我们令 $\boldsymbol{\beta}_u = \sum_{v=0}^{u-1}\boldsymbol{\alpha}_v$。将 (33) 和 (34) 代入 (2)，可得:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{J}}\left(\boldsymbol{\alpha}_u\right) = \mathcal{J}\left(\mathbf{x}_k^{(u)} + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u\right) &= \frac{1}{2}\cdot\left\|\boldsymbol{\beta}_u + \boldsymbol{\alpha}_u\right\|^2 \\ &+ \frac{1}{2}\cdot\sum_{k=0}^{M-1}\left\|\mathbf{y}_k - \mathcal{H}_k\left(\mathbf{x}_k^{(u)} + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u\right)\right\|_{\mathbf{R}_k^{-1}}^2\,. \end{aligned}$$

在第 u 次迭代中，我们将 (33) 中的 $\boldsymbol{\alpha}_u$ 选为以下优化问题的解：

$$\boldsymbol{\alpha}_u^* = \arg\min_{\boldsymbol{\alpha}_u} \mathcal{J}\left(\mathbf{x}_k^{(u)} + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u\right). \tag{35}$$

该问题的解可近似如下：在迭代 u 处，考虑 $\mathcal{H}_k$ 关于 $\mathbf{x}_k^{(u)}$ 的线性化

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_k(\mathbf{x}_k) \approx \widehat{\mathcal{H}}_k^{(u)}(\mathbf{x}_k) &= \mathcal{H}_k\left(\mathbf{x}_k^{(u)}\right) + \mathbf{H}_k^{(u)} \cdot \left[\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_k^{(u)}\right] \\ &= \mathcal{H}_k\left(\mathbf{x}_k^{(u)}\right) + \mathbf{H}_k^{(u)} \cdot \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u,\end{aligned}$$

其中 $\mathbf{H}_k^{(u)} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ 是 $\mathcal{H}_k(\mathbf{x}_k)$ 在 $\mathbf{x}_k^{(u)}$ 处的雅可比矩阵，然后在迭代 u 处，采用下面的二次近似：

$$\begin{aligned}\widehat{\mathcal{J}}(\boldsymbol{\alpha}_u) &\approx \widetilde{\mathcal{J}}(\boldsymbol{\alpha}_u) \\ &= \frac{1}{2}\cdot\|\boldsymbol{\beta}_u + \boldsymbol{\alpha}_u\|^2 + \frac{1}{2}\cdot\sum_{k=0}^{M-1}\left\|\mathbf{y}_k - \widehat{\mathcal{H}}_k^{(u)}\left(\mathbf{x}_k^{(u)} + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u\right)\right\|_{\mathbf{R}_k^{-1}}^2 \\ &= \frac{1}{2}\cdot\|\boldsymbol{\beta}_u + \boldsymbol{\alpha}_u\|^2 + \frac{1}{2}\cdot\sum_{k=0}^{M-1}\left\|\mathbf{d}_k^{(u)} - \mathbf{Q}_k^{(u)}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u\right\|_{\mathbf{R}_k^{-1}}^2\end{aligned}$$

其中 $\mathbf{d}_k^{(u)} = \mathbf{y}_k - \mathcal{H}_k\left(\mathbf{x}_k^{(u)}\right) \in \mathbb{R}^{m\times 1}$，且 $\mathbf{Q}_k^{(u)} = \mathbf{H}_k^{(u)} \cdot \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2} \in \mathbb{R}^{m\times n}$。因此，

$$\begin{aligned}\nabla\widetilde{\mathcal{J}}_{\boldsymbol{\alpha}_u}(\boldsymbol{\alpha}_u) &= \boldsymbol{\beta}_u + \boldsymbol{\alpha}_u - \sum_{k=0}^{M}\left[\mathbf{Q}_k^{(u)}\right]^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\left[\mathbf{d}_k^{(u)} - \mathbf{Q}_k^{(u)}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u\right] \\ &= \left[\mathbf{I} + \sum_{k=0}^{M}\left[\mathbf{Q}_k^{(u)}\right]^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{Q}_k^{(u)}\right]\cdot\boldsymbol{\alpha}_u \\ &- \left[-\boldsymbol{\beta}_u + \sum_{k=0}^{M}\left[\mathbf{Q}_k^{(u)}\right]^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{d}_k^{(u)}\right] \in \mathbb{R}^{N\times 1},\end{aligned}$$

and

$$\nabla\widetilde{\mathcal{J}}_{\boldsymbol{\alpha}_u,\boldsymbol{\alpha}_u}(\boldsymbol{\alpha}_u) = \mathbf{I} + \sum_{k=0}^{M}\left[\mathbf{Q}_k^{(u)}\right]^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{Q}_k^{(u)}.$$

我们将搜索方向视为 $\nabla\widetilde{\mathcal{J}}_{\boldsymbol{\alpha}_u}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_u) = \mathbf{0}$ 的解，用于将部分分析增量计算到控制空间上，这是

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_u = \left[\nabla\widetilde{\mathcal{J}}_{\boldsymbol{\alpha}_u,\boldsymbol{\alpha}_u}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_u)\right]^{-1}\cdot\left[-\boldsymbol{\beta}_u + \sum_{k=0}^{M}\left[\mathbf{Q}_k^{(u)}\right]^T\cdot\mathbf{R}_k^{-1}\cdot\mathbf{d}_k^{(u)}\right],$$

但是，由于我们采用观测算子的线性近似来估计式（3）的下降方向，因此我们通过线搜索来估计部分分析增量：

$$\rho_u^* = \arg \min_{\rho_u \in [0,\,1]} \mathcal{J}\left(\mathbf{x}_k^{(u)} + \widehat{\mathbf{B}}_k^{1/2} \cdot [\rho_u \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}}_u]\right), \tag{36}$$

因此，下一次迭代为：

$$\mathbf{x}_k^{(u+1)} = \mathbf{x}_k^{(u)} + \mathbf{B}_k^{1/2} \cdot [\rho_u^* \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}}_u] \tag{37}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_u^* \approx \rho_u^* \cdot \hat{}\boldsymbol{\alpha}_u$，由此可得 $\boldsymbol{\beta}_u^* \approx \sum_{v=1}^{u-1} \rho_v^* \cdot \hat{}\boldsymbol{\alpha}_v$。重复此过程，直至满足某个停止准则（即达到最大迭代次数U）。所得分析状态为：

$$\overline{\mathbf{x}}_0^a = \overline{\mathbf{x}}_0^b + \mathbf{B}_0^{1/2} \cdot \sum_{u=1}^{U} \rho_u^* \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}}_u \,,$$

这不过是各次迭代中近似搜索方向的线性组合。因此，我们可以将式（32）中的 $\boldsymbol{\alpha}^a$ 近似为：

$$\boldsymbol{\alpha}^a \approx \sum_{u=1}^{U} \rho_u^* \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}}_u \,.$$

我们可以采用任意线搜索规则来求解优化问题（36）。综上，优化步数详见算法1。随后，可通过信息矩阵的平方根近似，在控制空间中构建后验集合。容易证明，后验误差统计为：

$$\boldsymbol{\alpha}^{a[e]} \sim \mathcal{N}\left(\boldsymbol{\alpha}^a,\, \left[\mathbf{I} + \sum_{k=0}^{M} \left[\mathbf{Q}_k^{(U)}\right]^T \cdot \mathbf{R}_k^{-1} \cdot \mathbf{Q}_k^{(U)}\right]^{-1}\right),\ \text{for } 1 \le e \le N\,, \tag{38}$$

相应的模式空间分析成员为：

$$\mathbf{x}_0^{a[e]} = \overline{\mathbf{x}}_0^a + \widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}^{a[e]} \,.$$

随后，对初始集合成员进行时间推进，从而恢复最优（集合）轨迹。在每个优化步中考虑无矩阵的 4D-Var 公式 [36]，即可避免 4D-Var-MC 中的矩阵求逆。

4.3 基于 MLEF 的无伴随 4D-Var 方法（4D-Var-MLEF）

通过在观测时刻采用异常矩阵（7）作为一组基向量，可以类似地将所提出的 4D-Var-MC 推导到集合空间中。于是，我们可以提出如下形式的迭代：

$$\mathbf{x}_k^{(u+1)} = \mathbf{x}_k^{(u)} + \boldsymbol{\Delta}\mathbf{X}_k \cdot \boldsymbol{\gamma}_u\,,\ \text{for } 0 \le u \le U\,, \tag{39}$$

算法1：基于修正 Cholesky 分解的无伴随4D-Var方法（4D-Var-MC）

函数 FIND_INITIAL_ANALYSIS_ENSEMBLE($\left\{\mathrm{y}_k, \mathrm{x}_k^b, \widehat{\mathrm{B}}_k^{1/2}, \mathrm{R}_k^{-1}\right\}_{k=0}^{\mathrm{M}}$)

$\boldsymbol{\alpha}^a \leftarrow \mathbf{0}$

对于 $k \leftarrow 1 \rightarrow M$，执行

$\mathbf{x}_k^{(0)} \leftarrow \overline{\mathbf{x}}_k^b$

结束循环

对于 $u \leftarrow 0 \rightarrow U$，执行

$\boldsymbol{\beta}_u^* \leftarrow \boldsymbol{\alpha}^a$

对于 $k \leftarrow 1 \rightarrow M$，执行 $\mathbf{y}_k \leftarrow \mathcal{H}_k\left(\mathrm{x}_k^{(u)}\right)$

$\mathbf{d}_k^{(u)}$

$\mathrm{Q}_k^{(u)} \leftarrow \mathrm{H}_k^{(u)} \cdot \widehat{\mathrm{B}}_k^{1/2}$ ▷ $\mathrm{H}_k^{(u)}$ 是 $\mathcal{H}_k(\mathrm{x}_k)$在 $\mathrm{x}_k^{(u)}$ 处的雅可比矩阵

结束循环

$\mathcal{J}_{\boldsymbol{\alpha}_u, \boldsymbol{\alpha}_u}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_u) \leftarrow \mathrm{I} + \sum_{k=0}^{M}\left[\mathrm{Q}_k^{(u)}\right]^T \cdot \mathrm{R}_k^{-1} \cdot \mathrm{Q}_k^{(u)}$

$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_u \leftarrow \left[\nabla \widetilde{\mathcal{J}}_{\boldsymbol{\alpha}_u, \boldsymbol{\alpha}_u}(\hat{\boldsymbol{\alpha}}_u)\right]^{-1} \cdot \left[-\boldsymbol{\beta}_u + \sum_{k=0}^{M}\left[\mathbf{Q}_k^{(u)}\right]^T \cdot \mathbf{R}_k^{-1} \cdot \mathbf{d}_k^{(u)}\right]$

$\rho_u^* \leftarrow$参数 $\min_{\rho_u \in [0,1]} \mathcal{J}\left(\mathrm{x}_k^{(u)} + \widehat{\mathrm{B}}_k^{1/2} \cdot [\rho_u \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}}_u]\right)$

对于 $k \leftarrow 1 \rightarrow M$ 而言

$\mathbf{x}_k^{(u+1)} \leftarrow \mathbf{x}_k^{(u)} + \mathrm{B}_k^{1/2} \cdot [\rho_u^* \cdot \hat{\boldsymbol{\alpha}}_u]$

结束循环

$\boldsymbol{\alpha}_u^* \leftarrow \rho_u^* \hat{\boldsymbol{\alpha}}_u$

$\boldsymbol{\alpha}^a \leftarrow \boldsymbol{\alpha}^a + \boldsymbol{\alpha}_u^*$

结束循环

$\overline{\mathbf{x}}_0^a \leftarrow \mathbf{x}_0^{(U)}$

对于 $e \leftarrow 1 \rightarrow N$ 而言 $\boldsymbol{\alpha}^{a[e]} \sim \mathcal{N}\left(\boldsymbol{\alpha}^a, \left[\mathrm{I} + \sum_{k=0}^{M}\left[\mathrm{Q}_k^{(U)}\right]^T \cdot \mathrm{R}_k^{-1} \cdot \mathrm{Q}_k^{(U)}\right]^{-1}\right)$

$\mathrm{x}_0^{a[e]} \leftarrow \overline{\mathbf{x}}_0^a + \widehat{\mathrm{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}^{a[e]}$

结束循环

<escape>return $\{\mathbf{x}_0^{a[e]}\}_{e=1}^N$</escape>

结束函数

其中 $\boldsymbol{\gamma}_u \in \mathbb{R}^{N\times 1}$。我们按照（34）–（36）中的推导方式进行类似推导，将控制空间 $\widehat{\mathrm{B}}_k^{1/2}$ 替换为集合空间 $\boldsymbol{\Delta}\mathrm{X}_k$。随后，通过考虑以下形式的线性化来近似搜索方向：

$$\mathcal{H}_k\left(\mathbf{x}_k\right) \approx \widehat{\mathcal{H}}_k^{(u)}\left(\mathbf{x}_k\right) \quad = \quad \mathcal{H}_k\left(\mathbf{x}_k^{(u)}\right) + \mathbf{H}_k^{(u)} \cdot \boldsymbol{\Delta}\mathbf{X}_k \cdot \boldsymbol{\alpha}_u\,,$$

与（36）类似，可以采用线搜索方法控制各次迭代的步长。该算法基于第 3.1 节讨论的 MLEF方法，成为一种无伴随方法；我们将其称为 4D-Var-MLEF。请注意，由于所有计算都在集合空间中进行，估计分析增量并更新分析的计算成本为：

$$\mathcal{O}\left(N^3 + N^2 \cdot m + N \cdot m \cdot n\right)\,.$$

作为一种缺点，4D-Var-MLEF 存在 MLEF 在全局收敛性方面的局限。

4.4 4D-Var-MC 的全局收敛性

为证明 4D-Var-MC 在观测同化过程中线搜索方法的收敛性，我们考虑模型（1）、（2），并作如下假设

$$\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T \cdot \left[\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*\right] < 0, \text{ for } 1 \le k \le K\,. \tag{40}$$

下一个定理给出了在 4D-Var-MC 方法中同化观测期间，确保线搜索方法全局收敛的必要条件。

定理 4.1. 若 (1)、(2) 和 (40) 成立，则 4D-Var-MC 中的线搜索会生成一个无限序列 $\left\{\mathrm{x}^{(u)}\right\}_{u=0}^{\infty}$，此时

$$\lim_{u\to\infty}\left[\frac{-\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T \cdot \widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*}{\left\|\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|}\right]^2 = 0 \tag{41}$$

成立。

证明。根据泰勒级数和均值定理，我们知道，

$$\begin{aligned}\mathcal{J}\left(\mathbf{x}_0^{(u)} + \rho_u^* \cdot \mathbf{B}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*\right) \quad &= \quad \mathcal{J}\left(\mathbf{x}_0^{(u)}\right) \\ &+ \quad \rho^* \cdot \int_0^1 \nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}_0^{(u)} + \rho_u^* \cdot t \cdot \mathbf{B}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*\right)^T \\ &\cdot \quad \mathbf{B}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^* \cdot dt\,,\end{aligned}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_u^*$ 由式（35）给出，因此，

$$\begin{aligned}\mathcal{J}\left(\mathbf{x}_0^{(u)}\right)-\mathcal{J}\left(\mathbf{x}_0^{(u+1)}\right) \quad &\geq \quad -\rho_u^*\cdot\int_0^1\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}_0^{(u)}+\rho_u^*\cdot t\cdot\mathbf{B}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right)^T\\ &\cdot \quad \mathbf{Q}^{(u)}\cdot\mathbf{w}^*\cdot dt\end{aligned}$$

对于射线 $\mathbf{x}^{(u+1)}$ 上的任意 $\mathbf{x}^{(u)}+\rho_u\cdot\widehat{\ }\mathbf{B}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*$，满足 $\rho_u\in[0,\,1]$，我们有

$$\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)-\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u+1)}\right)\geq\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)-\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}+\rho_u^*\cdot\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right),$$

因此：

$$\begin{aligned}\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right) \quad - \quad &\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u+1)}\right)\geq-\rho_u^*\cdot\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T\cdot\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\\ - \quad &\rho_u^*\cdot\int_0^1\left[\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}+\rho_u^*\cdot t\cdot\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right)-\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)\right]^T\\ \cdot \quad &\widehat{\mathbf{B}}^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\cdot dt\,,\end{aligned}$$

根据柯西-施瓦茨不等式，我们有

$$\begin{aligned}\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right) \quad - \quad &\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u+1)}\right)\geq-\rho_u^*\cdot\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T\cdot\widehat{\mathbf{B}}^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\\ - \quad &\rho_u^*\cdot\int_0^1\left\|\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}+\rho_u^*\cdot t\cdot\widehat{\mathbf{B}}^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right)-\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)\right\|\\ \cdot \quad &\left\|\widehat{\mathbf{B}}^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|\cdot dt\\ \geq \quad &-\rho_u^*\cdot\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T\cdot\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\\ - \quad &\rho_u^*\cdot\int_0^1 L\cdot\left\|\rho_u^*\cdot t\cdot\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|\cdot\left\|\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|\cdot dt\\ = \quad &-\rho_u^*\cdot\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T\cdot\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\\ - \quad &\rho_u^*\cdot L\cdot\left\|\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|\cdot\int_0^1\left\|t\cdot\rho_u^*\cdot\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|\cdot dt\\ = \quad &-\rho_u^*\cdot\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T\cdot\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*-\frac{1}{2}\cdot{\rho_u^*}^2\cdot L\cdot\left\|\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|^2,\end{aligned}$$

由于梯度是利普希茨连续的，我们可以选择

$$\rho_u^*=-\frac{\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T\cdot\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*}{L\cdot\left\|\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2}\cdot\boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|^2},$$

因此，

$$\begin{aligned}\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right) &- \mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u+1)}\right) \geq \frac{\left[\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T \cdot \widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*\right]^2}{L \cdot \left\|\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|^2} \\ &- \frac{1}{2} \cdot \frac{\left[-\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T \cdot \widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*\right]^2}{L \cdot \left\|\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|^2} \\ &= \frac{1}{2 \cdot L} \cdot \left[-\frac{\nabla\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)^T \cdot \widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*}{\left\|\widehat{\mathbf{B}}_0^{1/2} \cdot \boldsymbol{\alpha}_u^*\right\|}\right]^2 .\end{aligned}$$

根据 (1) 和 (40)，可知 $\left\{\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)\right\}_{u=0}^{\infty}$ 是一个单调递减的数列，且有下界，因此 $\left\{\mathcal{J}\left(\mathbf{x}^{(u)}\right)\right\}_{u=0}^{\infty}$ 存在极限，进而 (41) 成立。

□

5 实验设置

我们使用 Lorenz-96 模型 [31] 作为替代模型，以测试所比较的集合卡尔曼滤波实现。Lorenz-96 模型由以下常微分方程组 [10]描述:

$$\frac{dx_j}{dt} = \begin{cases} (x_2 - x_{n-1}) \cdot x_n - x_1 + F & \text{for } j = 1, \\ (x_{j+1} - x_{j-2}) \cdot x_{j-1} - x_j + F & \text{for } 2 \leq j \leq n-1, \\ (x_1 - x_{n-2}) \cdot x_{n-1} - x_n + F & \text{for } j = n, \end{cases} \tag{42}$$

其中， F是外力， $n = 40$ 是模型分量的数量。假设采用周期性边界条件。当 $F = 8$ 个时间单位时，该模型表现出混沌行为，因此它是一个与大气动力学 [22, 12]相关的合适替代问题。Lorenz-96 模型中的一个时间单位代表大气中的 120 小时（5 天）。

实验设置如下所述，与 [35] 中介绍的设置类似:

- 将一个初始随机解积分一段较长时间，以获得与模型 (42) 在动力学上相一致的初始条件 $\mathbf{x}_{-2}^* \in \mathbb{R}^{n\times 1}$ 。
- 通过从正态分布中抽取一个样本，在时间 t_{-2} 获得一个受扰动的背景解 $\mathbf{x}_{-2}^b$ ，

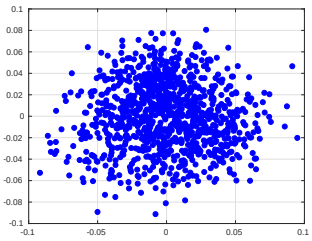
$$\mathbf{x}_{-2}^b \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{x}_{-2}^*, 0.05^2 \cdot \mathbf{I}\right) ,$$

随后，将该解积分 10 个时间单位（相当于大气中的 50 天），以获得与数值模型一致的背景解 $\mathbf{x}_{-1}^b$ 。

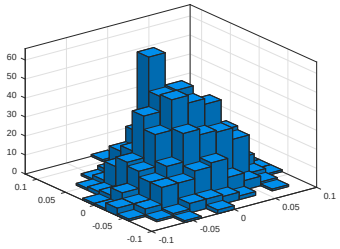
- 通过从分布中抽样，在背景状态周围构建初始扰动集合，

$$\mathbf{x}_{-1}^{b[i]} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{x}_{-1}^{b}, 0.05^2 \cdot \mathbf{I}\right) \text{ , for } 1 \leq i \leq N \,.$$

这些样本在 10 个时间单位内进行传播，以使其与模型动力学 (42) 保持一致，随后得到初始集合成员 $\mathbf{x}_0^{b[i]} \in \mathbb{R}^{n\times 1}$ 。我们构建一个初始成员池。图 1 展示了该集合的二维投影。



(a) 初始成员的二维投影。



(b) 二维初始背景误差分布。

图 1：实验所用的初始背景成员池。图中展示了基于两个主导方向的二维投影。

- 同化步骤数为 $M = 500$。每隔 12 小时收集一次观测，其误差统计由高斯分布描述。我们采用 Dormand和Prince方法 [8] ，并将绝对误差容限设为 10^{-7} ，以便每隔 0.5 个时间单位推进数值模型，

$$\mathbf{y}_k \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{H}_k \cdot \mathbf{x}_k^* \,, 0.01^2 \cdot \mathbf{I}\right) \text{ , for } 1 \leq k \leq M \,. \tag{43}$$

我们尝试每个同化步骤采用不同数量的观测，具体如下：

$$m = p \cdot n \,,$$

其中 $p = \{70\% \,, 100\%\}$，对应于 $m \in \{28, 40\}$ 个观测。模型状态中的观测是在不同的同化步骤中随机选取的。我们采用非线性观测算子 [51]:

$$\{\mathcal{H}\left(\mathbf{x}\right)\}_j = \frac{\{\mathbf{x}\}_j}{2} \cdot \left[\left(\frac{\left|\{\mathbf{x}\}_j\right|}{2}\right)^{\gamma-1} + 1\right] , \tag{44}$$

其中 j 表示模型状态中第 j 个被观测分量。同样， $1 \leq \gamma \leq 7$。请注意，这些实验是在完美模型假设下进行的。

- 我们以 0.1 为增量均匀取膨胀因子 $\rho \in [1.1, 1.9]$ 。
- 在实验过程中，我们尝试了不同的集合规模 $N \in \{20, 40\}$。
- 误差的 L–2 范数被用作精度的度量，在同化步骤 k中，其定义如下：

$$\lambda_k = \|\mathbf{x}_k^* - \overline{\mathbf{x}}_k^a\|_2 = \sqrt{[\mathbf{x}_k^* - \overline{\mathbf{x}}_k^a]^T \cdot [\mathbf{x}_k^* - \overline{\mathbf{x}}_k^a]}\,, \tag{45}$$

其中，$\mathbf{x}_k^*$ 和 $\mathbf{x}_k^a$ 分别为参考解和分析解。

- 均方根误差（RMSE）用于衡量滤波器在给定同化步数 M下的平均性能：

$$\lambda = \sqrt{\frac{1}{M} \cdot \sum_{k=1}^{M} \lambda_k^2}\,.$$

- 优化步数 U 等于 10。我们选择该数值主要基于两个原因：优化过程中涉及模型传播；此外，对于所比较的两种滤波器实现（4D-EnKF-MC 和 4D-MLEF）中的任一种，经过 10 次迭代后，均无法观察到代价函数值的进一步降低。

对于每种参数配置，我们进行 30 次实验，以深入了解误差行为及其相关统计特性。我们采用底层误差分布的前两个统计矩（均值和方差）来分析数值结果。分析分为两组： $1 \leq \gamma \leq 3$ 对应（近似）线性观测算子， $4 \leq \gamma \leq 7$对应高度非线性观测算子。

5.1 线性与非线性观测算子的结果 $1 \leq \gamma \leq 3$

对于 N 和 $1 \leq \gamma \leq 3$的不同取值，图2和图3分别展示了 $p = 70$%和 $p = 100$ %（完整观测网络）情况下的结果。在4D-EnKF-MC背景下，我们设定 $r = 2$ 以构建基向量集合。正如预期，4D-EnKF-MC和4D-MLEF这两种滤波器实现的准确性均优于无数据同化（NODA）预报，后者的结果也一并给出。需要注意的是，集合规模的增加会明显影响4D-EnKF-MC的性能；集合规模越大，后验估计的准确性越高，例如，L–2误差范数会降低若干个数量级。相比之下，这种行为在4D-MLEF方法中并不明显，只能观察到轻微改善。

需要注意的是，在同化步期间吸收更多观测信息，两个滤波器实现都能从中受益。也就是说，在同化窗口保持不变的情况下，随着观测数量增加，误差可以降低。同样地，这一模式在4D-EnKF-MC方法中比在4D-MLEF滤波器中更加明显。其原因如下：在同化步期间，4D-EnKF-MC方法构建的控制空间维度与模型维度相等。因此，观测带来的全部信息都可以被捕获到该空间中（其维度大于观测维度）；而4D-MLEF的空间维度则取决于集合规模。

5.2 高度非线性观测算子下的结果$4 \leq \gamma \leq 7$

对于不同的 N 和 $4 \leq \gamma \leq 7$取值，图4和图5分别展示了 $p = 70\%$和 $p = 100\%$（完整观测网络）下的结果。同样，我们在4D-EnKF-MC中设定 $r = 2$ 以构建基向量集合。正如预期，所有滤波器实现的结果都优于NODA预报。在所有情况下，4D-EnKF-MC给出的结果在L–2误差范数方面都优于4D-MLEF。对于 $p = 70\%$，随着 γ 的增大，各滤波器实现的结果差距逐渐缩小。不过，随着观测数量增加，4D-EnKF-MC的结果优于4D-MLEF。值得注意的是，在4D-EnKF-MC中，随着观测数量增加，分析校正的质量也会提高。集合规模的增加对两种滤波器的质量都有明显影响：集合规模越大，分析校正的质量越好。

5.3 进一步讨论

对于所有参数配置， $p = 70\%$ 和 $p = 100\%$ 对应的结果分别列于表 1 和表 2。对于 4D-EnKF-MC 方法，除 $r = 2$ 外，还尝试将 6 和 18 作为同化步骤中构建基向量集合的影响半径。这样，我们便能了解影响半径的大小如何影响初始分析增量的质量。首先需要注意的是，随着影响半径增大，初始分析校正的质量会下降。考虑到数值模型 (42) 中误差动力学的特殊形式，这一现象并不意外；该形式可能导致误差相关性快速衰减。例如，模型动力学会使相邻分量之间的误差高度相关。因此，较大的影响半径可能会影响后验初始集合成员的质量。请注意，4D-MLEF 在所有 γ 取值下的表现相似，而对于 4D-EnKF-MC，随着 γ 增加，其均方根误差会变差。不过，在所有情形下，4D-EnKF-MC 的结果都优于 4D-MLEF。在这两种滤波器实现中，增加集合成员数量均可提升性能。例如，在 4D-MLEF 中，集合规模越大，优化步骤中可用的自由度就越多。在

4D-EnKF-MC 方法在这种情况下则可以获得更多有关误差动力学的信息，从而拟合模型 (12)。

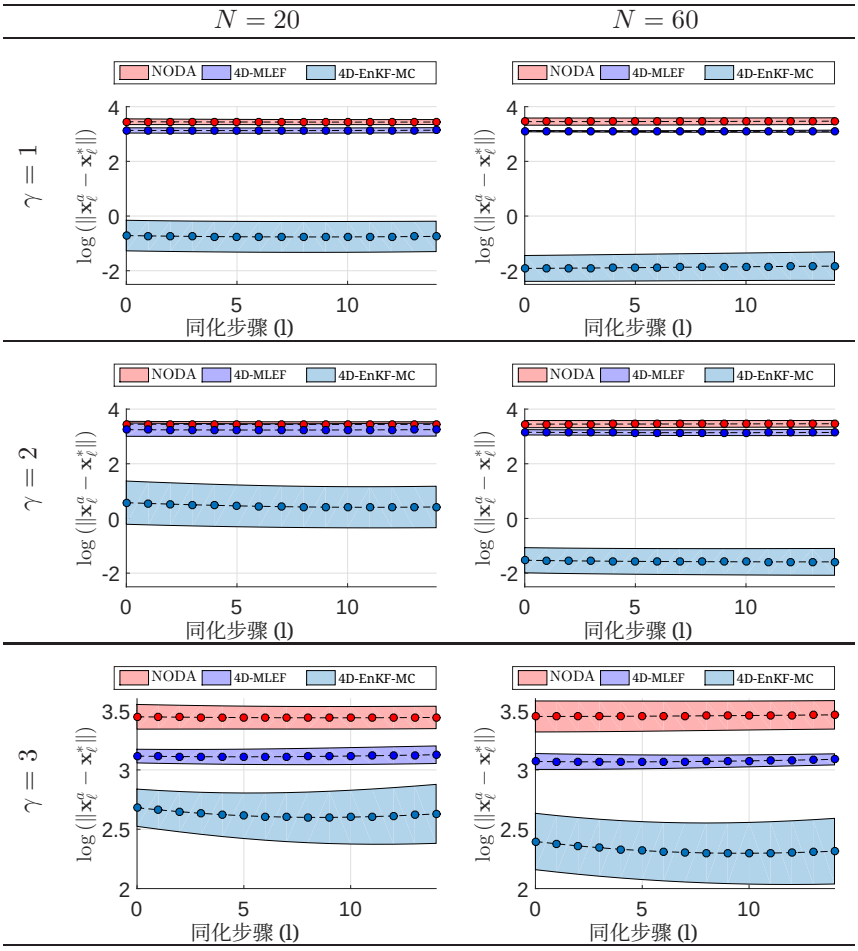


图2： $p = 70\%$ 的误差范数平均值（虚线）和标准差（阴影区域）。设 $N \in \{20, 60\}$。同理， $\gamma \in \{1, 2, 3\}$。

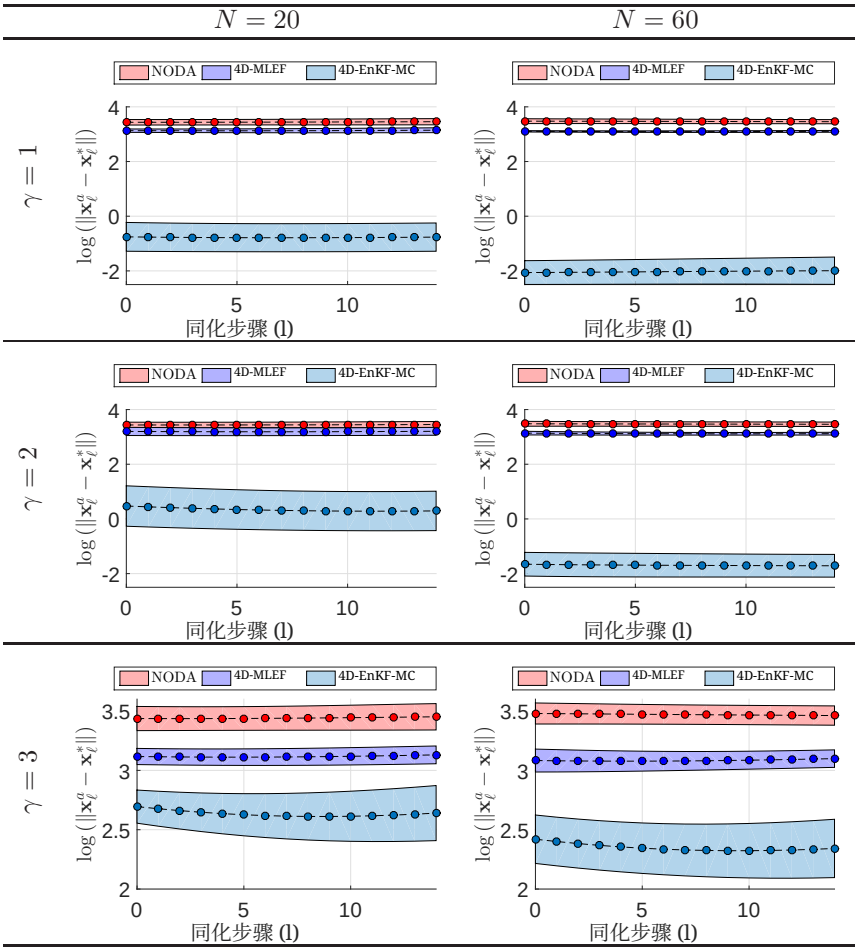


图3：30 次实验实现的误差范数平均值（虚线）和标准差（阴影区域），以及参数的取值$p = 100\%$ $N \in \{20, 60\}$和 $1 \leq \gamma \leq 3$。

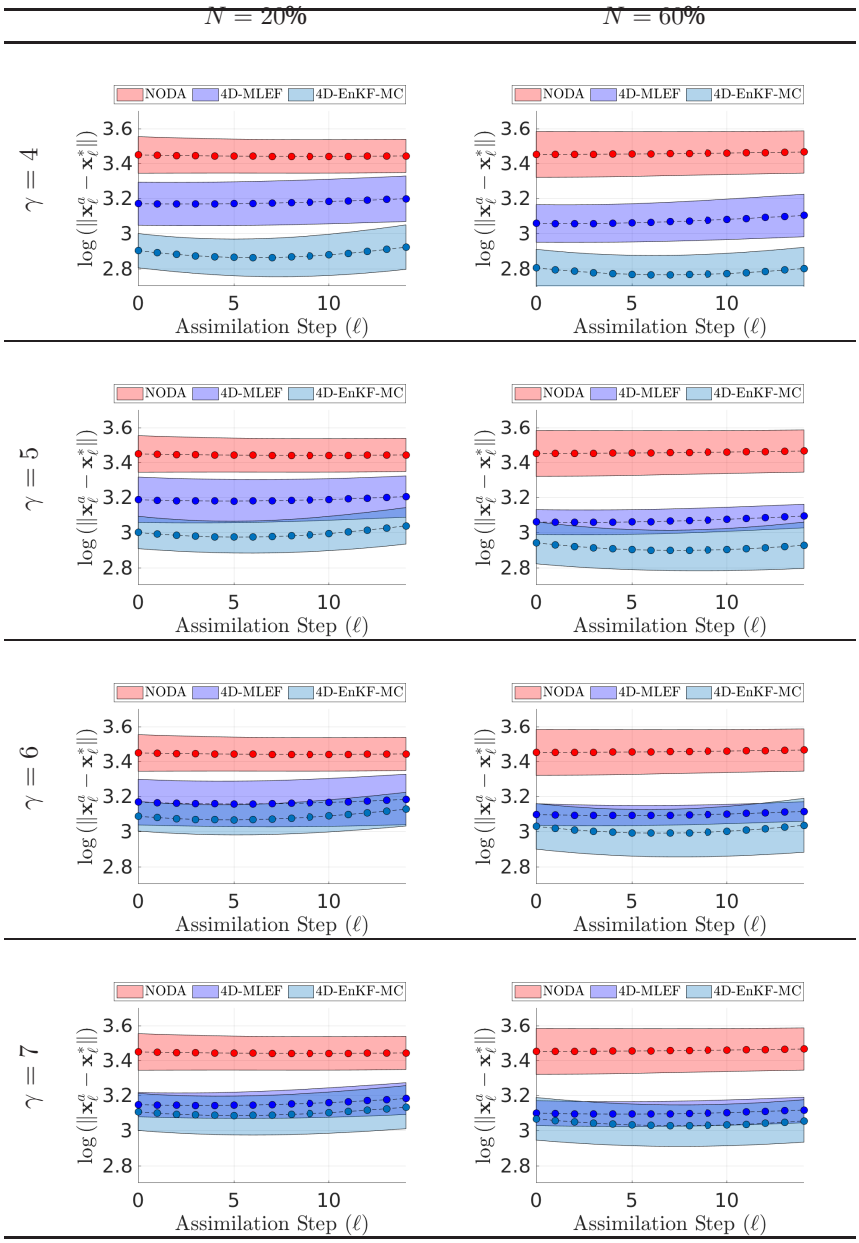


图4：30次实验实现的误差范数平均值（虚线）和标准差（阴影区域），以及参数$p = 70\%$ $N \in \{20, 60\}$和$4 \leq \gamma \leq 7$的取值。图中展示了各滤波器实现的对比结果，以及无数据同化（NODA）预报结果。

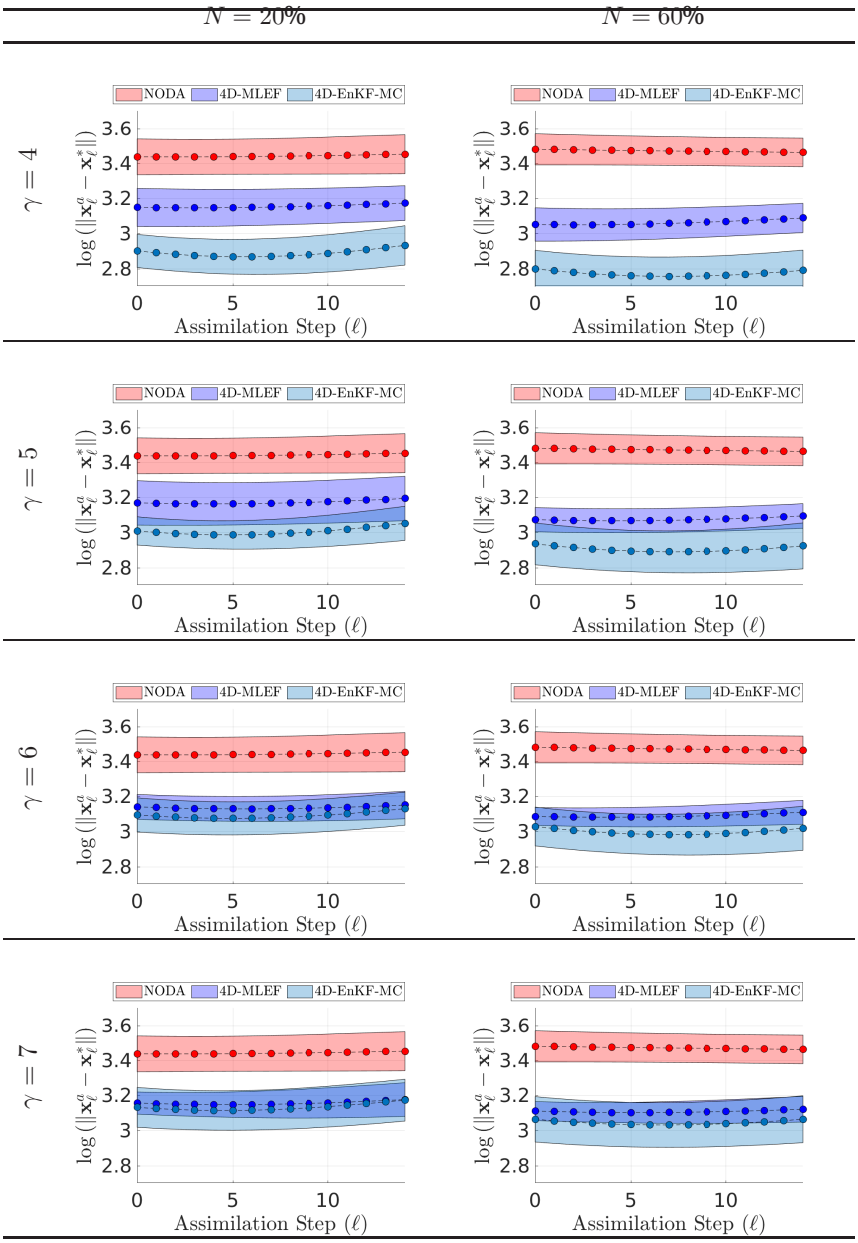


图5：30次实验实现的误差范数平均值（虚线）和标准差（阴影区域），以及参数$p = 100\%$ $N \in \{20, 60\}$和 $4 \leq \gamma \leq 7$的取值。

γ	N	r	4D-EnKF-MC	4D-MLEF	NODA
1	20	2	0.158	22.397	31.328
		6	0.549	22.967	
		18	18.233	19.743	
	60	2	0.144	22.206	
		6	0.173	22.167	
		18	0.629	22.697	
2	20	2	0.276	22.944	31.387
		6	2.172	26.318	
		18	18.725	19.968	
	60	2	0.148	22.609	
		6	0.234	23.261	
		18	1.665	25.636	
3	20	2	11.230	23.642	31.387
		6	14.081	22.601	
		18	20.093	20.985	
	60	2	7.730	22.077	
		6	10.534	21.661	
		18	12.979	21.499	
5	20	2	20.736	24.138	31.387
		6	20.065	24.411	
		18	20.970	22.574	
	60	2	19.225	21.930	
		6	18.550	21.596	
		18	18.736	21.772	
6	20	2	22.629	24.236	31.387
		6	21.977	23.924	
		18	21.386	23.040	
	60	2	20.540	22.365	
		6	20.449	22.200	
		18	20.927	21.826	
7	20	2	23.209	23.837	31.387
		6	22.368	23.527	
		18	21.650	23.476	
	60	2	20.947	22.432	
		6	21.088	22.275	
		18	22.512	22.551	

表 1：30 次实验实现的均方根误差值平均值及参数值： $p = 70\%$ $N \in \{20, 60\}$ 和 $1 \leq \gamma \leq 7$。

γ	N	r	4D-EnKF-MC	4D-MLEF	NODA
1	20	2	0.143	22.396	31.463
		6	0.520	22.948	
		18	17.963	19.680	
	60	2	0.110	22.159	
		6	0.145	22.160	
		18	0.536	22.522	
2	20	2	0.280	22.838	31.404
		6	1.890	24.636	
		18	18.591	19.748	
	60	2	0.131	22.349	
		6	0.202	22.691	
		18	1.476	23.618	
3	20	2	11.261	23.013	31.404
		6	14.209	22.643	
		18	20.046	20.998	
	60	2	8.117	22.882	
		6	10.734	21.926	
		18	12.720	21.607	
5	20	2	20.463	23.668	31.404
		6	20.310	24.062	
		18	21.019	22.643	
	60	2	19.090	22.293	
		6	18.432	21.718	
		18	18.842	21.701	
6	20	2	22.188	23.586	31.404
		6	22.128	23.080	
		18	21.343	23.024	
	60	2	20.197	22.196	
		6	20.216	22.026	
		18	20.955	22.054	
7	20	2	23.676	24.389	31.404
		6	23.089	23.566	
		18	21.626	23.394	
	60	2	21.098	22.340	
		6	21.197	22.437	
		18	21.785	22.226	

表 2：30 次实验实现的均方根误差值平均值及参数值： $p = 100\%$ $N \in \{20, 60\}$, 以及 $1 \leq \gamma \leq 7$。

6 结论

我们提出了两种用于非线性资料同化的无伴随 4D-Var 方法。这两种方法都构建控制空间，以避免在 4D-Var 框架中对伴随

模型的内在需求。其技术流程如下：基于一组模型实现，在观测时刻构建控制空间，然后将模型状态约束在这些控制空间所张成的空间内。通过对观测算子进行线性化，并结合线搜索优化方法，在提出的空间中计算分析增量。只要控制空间的维数与模型空间的维数相同，就可以证明该方法具有全局收敛性。我们还提出了一种无矩阵方法，用于计算搜索方向，其计算开销随模型维数线性增长；这一特点在资料同化业务应用场景中颇具优势。我们使用 Lorenz-96 模型和非线性观测算子进行了实验测试。结果表明，这两种滤波器都能以合理的均方根误差计算出误差分布的初始后验众数。此外，4D-EnKF-MC 可用于减轻抽样噪声的影响，并确保线搜索方法在优化步骤中收敛。

致谢

本研究部分由 UN 2018-38 项目资助，并得到哥伦比亚北方大学应用数学与计算机科学实验室的支持。

利益冲突

作者声明不存在任何利益冲突。

参考文献

[1] Arulampalam, M.S., Maskell, S., J. Neil, G., Clapp, T.: 用于在线非线性/非高斯贝叶斯跟踪的粒子滤波器教程。《IEEE 信号处理汇刊》50, 174–188 (2002)[2] Battiti, R.: 用于学习的一阶和二阶方法：介于最速下降法与牛顿法之间。《神经计算》4(2), 141–166 (1992)[3] Bickel, P.J., Levina, E., 等: 通过阈值化进行协方差正则化。《统计年刊》36(6), 2577–2604 (2008)[4] Bickel, P.J., Levina, E., 等: 大型协方差矩阵的正则化估计。《统计年刊》36(1), 199–227 (2008)[5] Chen, Y., Oliver, D.S.: 多相流资料同化中集合卡尔曼滤波的交叉协方差与局地化。《计算地球科学》14(4), 579–601 (2010)[6] Conn, A.R., Gould, N.I., Toint, P.L.: 信赖域方法，第 1 卷。Siam (2000)

[7] Curtis, F.E., Robinson, D.P., Samadi, M.：一种用于非凸优化的信赖域算法，其最坏情况下的迭代复杂度为。Mathematical Programming 162(1-2), 1–32 (2017)[8] Dormand, J.R., Prince, P.J.：一类嵌入式龙格–库塔公式。Journal of Computational and Applied Mathematics 6(1), 19–26 (1980)[9] Evensen, G.：集合卡尔曼滤波器：理论公式与实际应用。Ocean Dynamics 53(4), 343–367 (2003)[10] Fertig, E.J., Harlim, J., Hunt, B.R.：4D-Var与四维集合卡尔曼滤波器的比较研究：基于Lorenz-96的完美模型模拟。Tellus A 59(1), 96–100 (2007)[11] Fletcher, R., Reeves, C.M.：通过共轭梯度法进行函数最小化。The Computer Journal 7(2), 149–154 (1964)[12] Gottwald, G.A., Melbourne, I.：利用噪声检测确定性系统中的混沌。Physica D: Nonlinear Phenomena 212(1), 100–110 (2005)[13] Greybush, S.J., Kalnay, E., Miyoshi, T., Ide, K., Hunt, B.R.：平衡与集合卡尔曼滤波器的局地化技术。Monthly Weather Review 139(2), 511–522 (2011)[14] Grippo, L., Lampariello, F., Lucidi, S.：一种用于牛顿法的非单调线搜索技术。SIAM Journal on Numerical Analysis 23(4), 707–716 (1986)[15] Grippo, L., Lampariello, F., Lucidi, S.：一种用于无约束优化的带非单调线搜索的截断牛顿法。Journal of Optimization Theory and Applications 60(3), 401–419 (1989)[16] Hager, W.W., Zhang, H.：非线性共轭梯度法综述。Pacific Journal of Optimization 2(1), 35–58 (2006)[17] Harlim, J., Hunt, B.R.：四维局地集合变换卡尔曼滤波器：基于全球环流模型的数值实验。Tellus A: Dynamic Meteorology and Oceanography 59(5), 731–748 (2007)[18] Hosseini, S., Huang, W., Yousefpour, R.：黎曼流形上局部利普希茨函数的线搜索算法。SIAM Journal on Optimization 28(1), 596–619 (2018)[19] Houtekamer, P.L., Mitchell, H.L.：使用集合卡尔曼滤波技术进行资料同化。Monthly Weather Review 126(3), 796–811 (1998)[20] Huang, X.Y., Xiao, Q., Barker, D.M., Zhang, X., Michalakes, J., Huang, W., Henderson, T., Bray, J., Chen, Y., Ma, Z., 等：WRF的四维变分资料同化：公式推导与初步结果。Monthly Weather Review 137(1), 299–314 (2009)

[21] Kalnay, E.：《大气建模、资料同化与可预报性》。剑桥大学出版社（2003）[22] Karimi, A., Paul, M.R.：《Lorenz-96 模型中的广泛混沌》。Chaos：非线性科学跨学科期刊 20(4)，043105（2010）[23] Knoll, D.A., Keyes, D.E.：《无雅可比矩阵的牛顿–Krylov 方法：方法与应用综述》。计算物理学杂志 193(2)，357–397（2004）[24] Lahoz, B.K.W., Menard, R.：《资料同化》。Springer（2010）[25] Levina, E., Rothman, A., Zhu, J., 等：《通过嵌套套索惩罚对大型协方差矩阵进行稀疏估计》。应用统计年鉴 2(1)，245–263（2008）[26] Lewis, R.M., Torczon, V., Trosset, M.W.：《直接搜索方法：过去与现在》。计算与应用数学杂志 124(1-2)，191–207（2000）[27] Liu, C., Xiao, Q., Wang, B.：《一种基于集合的四维变分资料同化方案。第一部分：技术公式与初步测试》。月刊天气评论 136(9)，3363–3373（2008）[28] Loke, M.H., Barker, R.：《通过拟牛顿方法快速对视电阻率伪剖面进行最小二乘反演》。地球物理勘探 44(1)，131–152（1996）[29] Lorenc, A.C.：《集合卡尔曼滤波器在数值天气预报中的潜力——与4D-Var 的比较》。英国皇家气象学会季刊：大气科学、应用气象学与物理海洋学期刊 129(595)，3183–3203（2003）[30]Lorenc, A.C., Bowler, N.E., Clayton, A.M., Pring, S.R., Fairbairn, D.：《全球数值天气预报中混合-4DEnVar 与混合-4DVar 资料同化方法的比较》。月刊天气评论 143(1)，212–229（2015）[31] Lorenz, E.N.：《设计混沌模型》。大气科学杂志 62(5)，1574–1587（2005）。DOI 10.1175/JAS3430.1[32] Miyoshi, T., Kunii, M.：《采用天气研究与预报模型的局地集合变换卡尔曼滤波器：真实观测实验》。纯粹与应用地球物理学 169(3)，321–333（2012）[33] Mor´e, J.J., Sorensen, D.C.：《计算信赖域步长》。SIAM 科学与统计计算杂志 4(3)，553–572（1983）[34] Mor´e, J.J., Thuente, D.J.：《具有充分下降保证的线搜索算法》。ACM 数学软件汇刊（TOMS）20(3)，286–307（1994）

[35] Nerger, L., Schulte, S., Bunse-Gerstner, A.: 《模型非线性与局地化对集合卡尔曼平滑的影响》。英国皇家气象学会季刊 140(684)，2249–2259（2014）[36] Nino-Ruiz, E.D., Guzman-Reyes, L.G., Beltran-Arrieta, R.: 《一种通过修正Cholesky分解和迭代Woodbury 矩阵公式实现的无伴随四维变分资料同化方法》。非线性动力学 99(3)，2441–2457（2020）[37] Nino-Ruiz, E.D., Sandu, A., Deng, X.: 《基于修正Cholesky分解的集合卡尔曼滤波器并行实现》。计算科学杂志（2017）[38] Nino-Ruiz, E.D., Sandu, A., Deng, X.: 《基于修正Cholesky分解的集合卡尔曼滤波器实现及其在逆协方差矩阵估计中的应用》。SIAM 科学计算杂志 40(2)，A867–A886（2018）[39] Nocedal, J.: 《以有限存储方式更新拟牛顿矩阵》。计算数学 35(151)，773–782（1980）[40] Pan, V.Y., Branham, S., Rosholt, R.E., Zheng, A.L.: 《结构化矩阵的牛顿迭代》。载于: 《具有结构矩阵的快速可靠算法》，第189–210页。SIAM（1999）[41] Reichle, R.H.: 《地球科学中的资料同化方法》。水资源进展 31(11)，1411–1418（2008）[42]Rothman, A.J., Levina, E., Zhu, J.: 《大型协方差矩阵的广义阈值化》。美国统计学会杂志 104(485)，177–186（2009）[43] Ruiz, E.D.N., Sandu, A.: 《一种用于变分资料同化的无导数信赖域框架》。计算与应用数学杂志 293，164–179（2016）[44] Savard, G., Gauvin, J.: 《非线性双层规划问题的最速下降方向》。运筹研究通讯 15(5)，265–272（1994）[45] Shanno, D.F.: 《函数最小化中拟牛顿方法的条件性》。计算数学 24(111)，647–656（1970）[46] Shi, Z.J.: 《无约束优化线搜索方法的收敛性》。应用数学与计算 157(2)，393–405（2004）[47] Stroud, J.R., Katzfuss, M., Wikle, C.K.: 《用于序贯状态与参数估计的贝叶斯自适应集合卡尔曼滤波器》。月刊天气评论 146(1)，373–386（2018）

[48] Tr'emolet, Y.：不完美模型在 4d-var 中的处理。《皇家气象学会季刊：大气科学、应用气象学与物理海洋学期刊》132(621)，2483–2504（2006）[49] Tr´emolet, Y.：增量式 4d-var 收敛性研究。《Tellus A：动力气象学与海洋学》59(5)，706–718（2007）[50] Uschmajew, A.、Vandereycken, B.：低秩矩阵簇上的线搜索方法与秩增加。载于：2014 年国际非线性理论及其应用研讨会（NOLTA2014）论文集，第 52–55 页（2014）[51]Van Leeuwen, P.J.、Cheng, Y.、Reich, S.：非线性资料同化，第 2 卷。Springer（2015）[52] Vanderplaats, G.N.：工程设计中的数值优化技术：及其应用，第 1 卷。McGraw-Hill，纽约（1984）[53] Wang, X.、Hamill, T.M.、Whitaker, J.S.、Bishop, C.H.：混合集合变换卡尔曼滤波器–最优插值与集合平方根滤波器分析方案的比较。《月刊天气评论》135(3)，1055–1076（2007）[54] Wright, S.、Nocedal, J.：数值优化。Springer Science 35(67-68)，7（1999）[55] Zhou, W.、Akrotirianakis, I.、Yektamaram, S.、Griffin, J.：一种用于非凸优化的无矩阵线搜索算法。《优化方法与软件》，第 1–24 页（2017）[56] Zupanski, M.：最大似然集合滤波器：理论方面。《月刊天气评论》133(6)，1710–1726（2005）。DOI 10.1175/MWR2946.1