



HAL
open science

Les algorithmes et la puissance de calcul dans les techniques de prévision pour les géosciences en grande dimension vus sous l'angle de l'optimisation mathématique

Serge Gratton, Selime Gürol, Ehouarn Simon, Philippe Toint

► To cite this version:

Serge Gratton, Selime Gürol, Ehouarn Simon, Philippe Toint. Les algorithmes et la puissance de calcul dans les techniques de prévision pour les géosciences en grande dimension vus sous l'angle de l'optimisation mathématique. Colloque Modélisation: succès et limites (2016), Dec 2016, Paris, France. pp.37-47. hal-03636585

HAL Id: hal-03636585

<https://hal.science/hal-03636585>

Submitted on 11 Apr 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Open Archive Toulouse Archive Ouverte

OATAO is an open access repository that collects the work of Toulouse researchers and makes it freely available over the web where possible

This is an author's version published in:

<http://oatao.univ-toulouse.fr/22585>

Official URL

<https://www.cnrs.fr/insmi/spip.php?article2219>

To cite this version: Gratton, Serge and Gürol, Selime and Simon, Ehouarn and Toint, Philippe *Les algorithmes et la puissance de calcul dans les techniques de prévision pour les géosciences en grande dimension vus sous l'angle de l'optimisation mathématique*. (2018) In: Colloque Modélisation : succès et limites (2016), 6 December 2016 (Paris, France).

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository administrator: tech-oatao@listes-diff.inp-toulouse.fr

Les algorithmes et la puissance de calcul dans les techniques de prévision pour les géosciences en grande dimension vus sous l'angle de l'optimisation mathématique

S. Gratton^{*}, S. Gürol[†], E. Simon[‡] and Ph. L. Toint[§]

1 Les hypothèses sous-jacentes au problème de prévision

1.1 La prévision de l'état d'un système dynamique issu des Géosciences

Les problèmes de prévision dans les géosciences sont multiples et importants. Les enjeux applicatifs en sont extrêmement nombreux et bien connus de tous, qu'il s'agisse notamment de la prévision dans les domaines météorologiques, océanographiques, ou en neutronique, pour ne citer que quelques exemples.

Nous décrivons ici les principaux ingrédients rencontrés dans un système de prévision Géophysique, en empruntant principalement des dénominations issues de la prévision numérique du temps [13, 38]. L'objectif peut-être de déterminer, voire de prédire, l'état d'un système dont le comportement peut-être décrit par des équations mathématiques formalisant des relations entre des variables d'état du système et leurs dérivées. Il peut aussi s'agir d'utiliser de telles équations pour mieux comprendre les propriétés de certains systèmes physiques, notamment dans le cadre de ré-analyses de situations passées. Ces équations modélisent des relations de la physique mathématique, comme la relation fondamentale de la dynamique, ou la conservation de quantités telles que la masse. Appelées *équations du modèle*, ces équations sont considérées comme une bonne approximation de la réalité du phénomène physique observé, et les résoudre permet d'obtenir les états du système sur une fenêtre temporelle donnée. Pour

^{*}Université de Toulouse, INP, IRIT, Toulouse, France. Email: serge.gratton@enseeiht.fr

[†]CERFACS, Toulouse, France. Email: selime.gurol@cerfacs.fr

[‡]Université de Toulouse, INP, IRIT, Toulouse, France. Email: ehouarn.simon@enseeiht.fr

[§]NAXYS, University of Namur, Namur, Belgium. Email: philippe.toint@unamur.be

fixer les idées, les variables d'état d'un système sont des quantités physiques, pouvant être par exemple des champs de vitesse, de pression, de densité ou de température d'un fluide. Le système dynamique peut par exemple résulter des équations de Navier-Stokes dans le cas de la prévision numérique du temps.

Malheureusement les représentations disponibles des systèmes dynamiques en jeu ne permettent pas de réaliser des prévisions sur de (suffisamment) longues périodes temporelles, pour un certain nombre de raisons. La plus fondamentale d'entre elles résulte de la nature chaotique des systèmes considérés : lorsque la trajectoire d'un système est simulée à partir d'une certaine condition initiale, l'état à un instant donné caractéristique de l'équation considérée présente une forte dépendance à la condition initiale, ce qui nécessite une connaissance très précise de celle-ci, souvent difficile, voire impossible à obtenir. Une autre raison est la nature approchée des modèles utilisés pour représenter la physique, qui ne représente que d'une manière imparfaite la réalité. Une troisième consiste dans le fait que les équations mathématiques sont écrites avec des variables continues, que les champs physiques recherchés sont eux même des fonctions de ces variables, et qu'il est nécessaire de réaliser des approximations discrètes de ces équations pour les résoudre sur ordinateur.

Une démarche adoptée de longue date, que l'on pourrait faire remonter aux travaux de Gauss du début du 19^{ème} siècle, consiste à utiliser, en plus des modèles dynamiques précités des *observations* pour recalibrer périodiquement les prédictions à la réalité. Ce procédé fécond connu sous la dénomination d'"assimilation de données", a été l'objet de progrès qualitatifs importants ; l'approche actuellement utilisée s'appuie fortement sur les travaux autour du filtre de Kalman introduit dans le milieu du 20^{ème} siècle, et sur des évolutions ayant permis de le rendre utilisable pour des problèmes de grande dimension, qui se retrouvent sous la domination d'"assimilation variationnelle de données".

1.2 Modélisation variationnelle du problème

L'approche sur laquelle nous allons nous focaliser repose dans sa version la plus simple sur le problème d'estimation d'un état x_0 à l'instant t_0 à partir de m observations $y_i, i = 1 \dots m$, réalisées par des dispositifs terrestres ou satellitaires. Le système dynamique est représenté par un opérateur de résolution non linéaire \mathcal{M}_i tel que l'état x_i à un instant t_i est obtenu par l'évaluation $x_i = \mathcal{M}_i(x_0)$. Les observations y_i à l'instant t_i sont obtenues à partir de la connaissance de l'état du système x_i grâce à un opérateur \mathcal{H} , dit d'observation, non linéaire dans le cas général. Cet opérateur permet de reconstruire une approximation de y_i de la forme $\mathcal{H}(x_i)$. Un décompte du nombre d'inconnues (appelé aussi nombre de degré de libertés du problème) par rapport au nombre d'observations disponibles révèle souvent la nature sous-déterminée du problème. Il faut alors ajouter une information qualifiée d'*a priori* pour pallier cette déficience. Une approche répandue consiste alors à introduire une connaissance approchée de l'état x_0 , par exemple obtenue suite à un exercice de prévision mené sur des données passées.

Le cadre mathématique permettant de construire cette approximation repose

aussi sur la modélisation des erreurs de mesures et d'*a priori*. Lorsque celles-ci sont supposées Gaussiennes non biaisées, et de matrices de variances-covariances respectives R et B , le problème d'estimation de x_0 prend la forme du problème d'*optimisation* suivant [8, 12] :

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \frac{1}{2} \|x - x_b\|_{B^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^N \|\mathcal{H}_j(\mathcal{M}_j(x)) - y_j\|_{R_j^{-1}}^2 \quad (1)$$

où

- $x \equiv x(t_0)$ est la variable de contrôle dans \mathbb{R}^n ,
- \mathcal{M}_j est l'opérateur de modèle : $x(t_j) = \mathcal{M}_j(x(t_0))$,
- \mathcal{H}_j est l'opérateur d'observation : $y_j \approx \mathcal{H}_j(x(t_j))$,
- les observations y_j et l'*a priori* x_b sont bruités,
- R_j et B sont les matrices de variance-covariance associées à ces bruits Gaussiens de moyenne nulle.

Ce problème est un défi en soi, compte tenu de la dimension de l'espace de recherche où vit la variable x (plusieurs millions, dizaines ou centaines de millions de degrés de liberté) et de part la non linéarité des opérateurs \mathcal{M} et \mathcal{H} intervenant dans la fonction à minimiser. Des stratégies innovantes sont à explorer pour rendre cette minimisation possible dans des temps de calcul qui sont bien inférieurs au temps d'écoulement du phénomène physique observé, comme le réclame l'exercice de prévision. L'utilisation de calculateurs permettant *un parallélisme massif* est alors nécessaire pour des applications de la vie quotidienne telles que la prévision numérique du temps, l'approche la plus répandue reposant sur une *décomposition dans le domaine spatial* ayant pour but une répartition équilibrée des calculs entre les différents processeurs ou coeurs des architectures de calcul.

2 Les algorithmes classiques d'optimisation pour l'assimilation des données variationnelle

2.1 Les algorithmes variationnels primaux et duaux

Le problème d'optimisation (1) représente un challenge important en soi en raison de la magnitude de n . Les méthodes traditionnellement employées sont des variantes de la méthode de Gauss-Newton ([27]). Dans ce type de méthode, une approximation de la fonction f est réalisée autour d'un itéré $x^{(k)}$ de la méthode par linéarisation des quantités figurant dans la norme $\|\bullet\|_{R_j^{-1}}^2$, ce qui conduit à un processus itératif $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \delta x^{(k)}$, où $\delta x^{(k)}$ est solution du problème aux moindres carrés *linéaires* noté

$$\min_{\delta x^{(k)} \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|\delta x^{(k)} - (x_b - x^{(k)})\|_{B^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \|H^{(k)} \delta x^{(k)} - d^{(k)}\|_{R^{-1}}^2. \quad (2)$$

Une formule explicite $\delta x^{(k)} = (B^{-1} + H^{(k)T} R^{-1} H^{(k)})^{-1} [H^{(k)T} R^{-1} d^{(k)} + B^{-1} (x_b - x^{(k)})]$ est disponible pour le problème (2), mais cette formule n'est pas utilisable

en pratique car trop coûteuse en ressource de calcul : il s'agirait de résoudre un système linéaire d'ordre n , avec n grand, alors que la matrice du système n'est disponible que par l'intermédiaire de son action sur un vecteur dans les applications concernées. Fort heureusement, la théorie des régions de confiance montre qu'il n'est pas nécessaire de résoudre (2) avec précision, mais que la solution approximative réalisant une décroissance de Cauchy [10] permet d'obtenir une convergence du processus non linéaire pour la méthode de Gauss-Newton. C'est cette méthode qui est retenue en pratique, la solution approximative étant obtenue par un algorithme de gradients conjugués, éventuellement accéléré (on parle de préconditionnement) par des techniques issues des approximations quasi-Newton d'une matrice symétrique [50, 30]. Ces stratégies d'accélération sont absolument cruciales pour rendre la méthode utilisable en lui permettant d'atteindre des solutions approchées de qualité en peu d'itérations dans les problèmes de grande taille considérés.

En utilisant par exemple la théorie de la dualité, il est aussi possible de montrer que $\delta x^{(k)}$ peut aussi être obtenu grâce à l'expression alternative mathématiquement équivalente $\delta x^{(k)} = BH^{(k)T}(H^{(k)}BH^{(k)T} + R)^{-1}(d^{(k)} - H^{(k)}(x_b - x^{(k)}))$. L'avantage de cette formule est que le système à résoudre a pour ordre le nombre d'observations et non le nombre n d'inconnues [1, 2, 12, 14, 32], ce qui présente un avantage certain lorsque le premier est bien inférieur au second. Ce système peut aussi être résolu itérativement, et une décroissance de Cauchy peut être obtenue au prix d'une utilisation d'un produit scalaire adapté dans la méthode des gradients conjugués dans un algorithme connu sous le nom de RPCG [32, 31, 25]. Cette méthode peut aussi être accélérée par des méthodes quasi-Newton [24], ce qui, comme précédemment, est crucial pour la performance de la méthode sur ordinateur.

2.2 La prise en compte de l'erreur modèle

Dans le formalisme ci-dessus, le système dynamique est supposé connu sur l'intervalle d'assimilation des mesures y_i ce qui peut s'avérer être une hypothèse trop forte, qu'il est souhaitable de relaxer. De même, le problème d'optimisation (1) repose crucialement sur la connaissance des quantités (x_b, B) qui n'est pas toujours disponible avec la précision requise, ce qui invite à réaliser des assimilations longues permettant d'atténuer le rôle de cet *a priori* sur la solution. Ces deux raisons conduisent à considérer que le système dynamique soit à présent décrit par la relation aux différences stochastiques $x(t_j) = \mathcal{M}_j(x(t_0)) + \epsilon_j$ où ϵ_j suit une loi Gaussienne de moyenne nulle et de matrice de variance-covariance Q_j . Une telle équation provient par exemple de la discrétisation temporelle d'une équation différentielle stochastique [44]. La prise en compte de cette modélisation conduit alors au problème d'optimisation dit à contrainte faibles [48, 49]

$$\min_{x_0, \dots, x_N \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} \|x_0 - x_b\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^N \|\mathcal{H}_j(x_j) - y_j\|_{\mathbf{R}_j^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \|x_j - \mathcal{M}_j(x_{j-1})\|_{\mathbf{Q}_j^{-1}}^2.$$

Ce type de problème ressemble fortement au problème (1), puisqu'il s'agit à nouveau d'une somme de carrés de normes. Il est toutefois à signaler que l'optimisation a cette fois lieu sur un ensemble de variables bien plus grand (N vecteurs x_i plutôt que un seul) que le problème vu dans la section (2.1), ce qui rend encore plus importante l'utilisation de méthodes d'optimisation performantes et de machines de calcul adaptées. La stratégie envisagée pour la résolution repose *in fine* sur une stratégie de Gauss-Newton dans laquelle une linéarisation des termes apparaissant dans les normes est réalisée pour donner lieu à la résolution d'une séquence de problèmes quadratiques [20, 21]

$$\min_{(\delta p, \delta w)} \frac{1}{2} \|\delta p - b\|_{D^{-1}}^2 + \frac{1}{2} \|\delta w - d\|_{R^{-1}}^2$$

sous la contrainte $\delta p = L\delta x$ and $\delta w = H\delta x$.

Dans cette formulation le premier terme prend en compte l'*a priori* et l'erreur de modèle, tandis que le second terme représente l'erreur d'observation. La matrice L est constituée d'opérateurs d'intégration des modèles linéarisés sur des sous-fenêtres, c'est à dire,

$$L = \begin{bmatrix} I & & & & & \\ -M_1 & I & & & & \\ & -M_2 & I & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & -M_N & I & \end{bmatrix},$$

où chaque matrice représente une intégration du modèle linéarisé sur un intervalle de temps $[t_j, t_{j+1}]$. Le succès de la méthode repose comme précédemment sur la capacité à trouver des techniques efficaces pour résoudre ce problème quadratique. La résolution directe du problème par les techniques de la section 1.2 est possible [25]. Plus de détails concernant la prise en compte de l'erreur modèle dans l'algorithme 4D-Var peuvent être obtenus dans les références [3, 16, 48, 49, 51, 52, 53]. Un point essentiel pour le succès applicatif de ces méthodes est d'introduire un *parallélisme en temps*, rendu possible de part la structure en sous-fenêtres temporelles du problème explicité dans la structure de la matrice L ci-dessus. Ce parallélisme en temps s'ajoute au parallélisme en espace traditionnellement utilisé, pour donner lieu à des algorithmes adaptés au parallélisme massif.

2.3 Parallélisation de l'algorithme 4D-Var à contraintes faibles

Plus récemment, une approche basée sur une méthode de Lagrangian Augmenté [43] a été proposée et permet une parallélisation en temps de l'algorithme 4D-Var (1). En ce qui concerne l'algorithme 4D-Var dit à contraintes faibles, nous présentons ici un point de vue différent sur le problème et qui a récemment

permis d'obtenir des résultats encourageants. En écrivant les conditions d'optimalités de Karush-Kuhn-Tucker, le problème se ramène à un problème de point de selle en grande dimension (voir [21, 20] pour les détails de la dérivation) :

$$\begin{pmatrix} D & 0 & L \\ 0 & R & H \\ L^T & H^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \\ \delta x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ d \\ 0 \end{pmatrix}$$

Une technique d'accélération prometteuse pour la résolution de ce système est basée sur des approximations de l'action de l'opérateur L^{-1} sur des champs physiques. Il est alors possible de montrer que cette méthode est susceptible d'introduire un degré de parallélisme intéressant ce qui permettrait d'exploiter efficacement les calculateurs parallèles actuels [23]. Il est à noter que l'utilisation de problème de point de selle a été évoquée à l'origine dans [37] comme une manière d'introduire du parallélisme dans le calcul des dérivées en assimilation variationnelle de données.

3 Vers une nouvelle génération d'algorithmes pour l'opérationnel

3.1 Les approches multi-niveaux

L'application des méthodes d'assimilation variationnelle de données aux fluides géophysiques, notamment dans le contexte de la prévision opérationnelle, a naturellement conduit - et continue toujours de conduire - au développement d'approches multi-niveaux afin de faire face à l'augmentation importante des dimensions des problèmes, résultant de l'augmentation de la résolution des modèles, de leurs couplages et de la masse des observations disponibles. L'idée générale de ces approches est de réaliser une partie des calculs sur des niveaux grossiers, où ils sont moins coûteux, en exploitant des complémentarités entre les niveaux qui garantissent une résolution satisfaisante du problème initial.

Du point de vue de la modélisation, ceci se traduit par le développement de modèles emboîtés, largement utilisés en météorologie et en océanographie. Ils permettent un accroissement local de la résolution, dans les zones où cela semble nécessaire, via l'intégration d'un même modèle sur une hiérarchie de grilles. Il est possible de prendre en compte cette structure multigrille emboîtée dans le processus de minimisation [47], ceci conduisant notamment au développement de modèles adjoints également emboîtés.

Il est également possible d'introduire des approches multi-niveaux dans l'espace des observations en exploitant l'approche duale en assimilation variationnelle de données. Les observations disponibles sur la fenêtre d'assimilation peuvent ainsi conduire à la définition d'une hiérarchie de grilles spatio-temporelles dans l'espace des observations. Il est alors possible d'introduire une sélection des observations au cours du processus de minimisation, basée sur la définition d'un indicateur d'erreur, quantifiant l'influence d'une observation sur la minimisation de la fonction de coût entre deux niveaux de grilles successifs [28]. Il s'agit

alors de réduire le temps de calcul en impliquant graduellement les observations dans le système pour qu’une partie des calculs soient réalisés sur des problèmes d’optimisation moins coûteux.

En gardant à l’esprit l’impératif de réduction des dimensions du problème en se basant sur l’impact des observations sur le système ou sur la quantité d’information qu’il est possible d’en extraire, des stratégies multi-niveaux basées sur une hiérarchie de grilles de l’espace de contrôle ont été proposées, afin d’obtenir une discrétisation optimale de celui-ci [7, 6]. Ceci conduit à résoudre un problème d’optimisation afin d’obtenir cette discrétisation optimale, préalablement à la résolution du problème d’assimilation de données.

Enfin, des stratégies multi-niveaux peuvent être introduites pour accélérer la résolution du problème d’optimisation (1). Ainsi, les méthodes multigrilles, initialement introduites pour accélérer la résolution de systèmes, potentiellement non-linéaires, exploitent la propriété de lissage des méthodes de relaxation appliquées à des problèmes elliptiques : élimination rapide des composantes hautes fréquences de l’erreur, mais lentes réduction des composantes basses fréquences. L’idée est donc d’introduire des étapes de corrections sur des grilles à plus basse résolution pour lesquelles les basses fréquences de l’erreur apparaissent à plus haute résolution. Appliqué à l’optimisation, cela consiste à introduire des étapes de minimisation sur des grilles à plus faible résolution en vue de réduire le nombre d’itérations effectuées lors de la minimisation de la fonction de coût haute résolution [29]. Néanmoins, la convergence de telles approches repose sur des propriétés intrinsèques au problème et aux méthodes et opérateurs utilisés pour le résoudre [34]. Dans le contexte de l’assimilation variationnelle de données, ceci renvoie aux propriétés de la matrice Hessienne de la fonction de coût (1), et aux différents opérateurs qui la constituent [42]. Plutôt que d’envisager l’utilisation de solveurs multigrilles pour lesquels la convergence ne serait pas garantie dans un système d’assimilation déjà implanté, une seconde stratégie multi-niveaux consiste en le développement de préconditionneurs multigrilles [15].

3.2 Les approches ensemblistes

Les méthodes d’ensemble apportent la possibilité de modéliser plus facilement des erreurs qui dépendent des écoulements dans les fluides géophysiques. Ces méthodes, qui sont basées sur une adaptation du filtre de Kalman [19], propagent l’information sur les erreurs au delà du cycle d’assimilation, contrairement aux méthodes variationnelles. Elles sont très faciles à paralléliser et sont naturellement adaptées aux architectures massivement parallèles. Ces filtres d’ensembles ont connu un essor important en géophysique, de part leur capacité à traiter des problèmes de grandes dimensions, et leur côté faiblement intrusif - pas ou peu de modification, ni de linéarisation, du modèle n’est requises. Elles souffrent néanmoins des effets des erreurs d’échantillonnage dus à la petite taille de l’ensemble - celui-ci ne peut difficilement dépasser quelques centaines de simulations - et requièrent des techniques d’inflation [36] et de localisation [45] afin de remédier aux biais d’assimilation résultant de l’utilisation d’un ensemble

de trop petite dimension.

Des hybridations entre les méthodes variationnelles et d'ensemble ont naturellement été proposées pour exploiter les avantages de chacune. Les premiers schémas hybrides [35, 40, 9] incorporent dans une approche variationnelle un terme de covariance supplémentaire issu d'un ensemble. Les perturbations ensemblistes sont ajoutées à la variable de contrôle, localisées afin de réduire l'erreur d'échantillonnage et avec préconditionnement pour conserver un nombre d'itérations limité. Cette approche est rapidement étendue en 4D (avec dimension temporelle) par [39, 11]. Le schéma d'assimilation hybride où les covariances propagées habituellement par le modèle linéaire tangent sont remplacées par des covariances ensemblistes, fournissant une alternative au 4D-Var classique.

Une autre stratégie ensembliste consiste à minimiser une fonctionnelle de type 3D- et/ou 4D-Var en approximant, et la matrice de covariance d'erreur d'ébauche \mathbf{B} et les dérivées de cette fonctionnelle depuis l'ensemble. Ceci conduit au développement de méthodes itératives ensemblistes - filtres ou lisseurs - [54, 46, 4, 5, 41] ou d'algorithmes 4D-Var ensemblistes (4D-EnVar) [18] construits sur des méthodes d'optimisation classiques et qui héritent des filtres de Kalman d'ensemble leur simplicité : le développement et la maintenance, souvent difficiles, du modèle adjoint (opérateur adjoint du modèle "linéarisé") ne sont pas requis, au contraire de l'algorithme 4D-Var. La non-disponibilité des modèles linéaire tangent et adjoint, requis pour le calcul du gradient de la fonction de coût, peut également être compensée par le développement d'algorithmes basés sur les méthodes d'optimisation sans dérivée [26].

4 Conclusion

Nous avons présenté une image des algorithmes variationnels pour aborder les problèmes d'assimilation de données en grande dimension. Cette vision est sans doute un peu partielle car elle est centrée sur les techniques d'optimisation qui ont constitué le coeur de nos activités de recherches ces quinze dernières années. Cet exposé serait donc largement incomplet si nous ne faisons pas mention des techniques de Filtrage de Kalman d'ensemble et de filtrage particulière, qui sont à l'étude en particulier dans la communauté des Geosciences et qui apportent des éclairages intéressants notamment concernant la quantification des incertitudes des prévisions. Chacune de ces techniques (variationnelle, ensembliste, particulière) a bien sûr ses forces, et de nombreuses pistes de recherches consistant à hybrider ces algorithmes sont à l'étude, et ont par exemple été récemment présentées au Workshop "Mathematical and Algorithmic Aspects of Data Assimilation in the Geosciences" à Oberwolfach, en Octobre 2016.

Pour finir, il est évident que les attentes sociétales augmentent relativement quant à la capacité à prévoir, et cette évolution se traduit directement par des changements au niveau de la physique et de la finesse des grilles de calcul attendus à l'avenir. C'est le cas par exemple pour la prise en compte de la topographie de l'humidité des sols pour la prévision des brouillards au voisinage des aéroports. De même une meilleure prévision et compréhension des phénomènes

Cevenol nécessite une évolution des grilles de calcul dans le même sens. Il s'avèrera sans doute important à l'avenir d'introduire de nouvelles variables dans le système d'assimilation, telles que la densité de particules, ou la concentration en aérosols, à nouveau en lien avec des problématiques prégnantes en termes de suivi de la qualité de l'air. De telles évolutions vont se traduire par une augmentation du nombre d'équations différentielles constituant le modèle, ce qui se traduira inévitablement par une demande croissante en capacité de calcul, et des exigences croissantes envers les algorithmes mathématiques permettant de rencontrer ces attentes sociétales.

Références

- [1] Akkraoui AE, Gauthier P. 2010. Convergence properties of the primal and dual forms of variational data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **136** : 107–115.
- [2] Akkraoui AE, Gauthier P, Pellerin S, Buis S. 2008. Intercomparison of the primal and dual formulations of variational data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **134** : 1015–1025.
- [3] Amodei L, 1995. Solution approchée pour un problème d'assimilation de données météorologiques avec prise en compte de l'erreur modèle. *C. R. Acad. Sci., Paris*, **321**, 1087–94.
- [4] M. Bocquet and P. Sakov. Combining inflation-free and iterative ensemble Kalman filters for strongly nonlinear systems. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 19 :383–399, 2012.
- [5] M. Bocquet and P. Sakov. An iterative ensemble Kalman smoother. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140 :1521–1535, 2014.
- [6] M. Bocquet and L. Wu. Bayesian design of control space for optimal assimilation of observations. Part II : Asymptotic solutions. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 137 :1357–1368, 2011.
- [7] M. Bocquet, L. Wu and F. Chevallier. Bayesian design of control space for optimal assimilation of observations. Part I : Consistent multiscale formalism. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 137 :1340–1356, 2011.
- [8] F. Bouttier and P. Courtier. Data assimilation concepts and methods. Technical report, ECMWF, Reading, England, 1999. ECMWF Meteorological Training Course Lecture Series.
- [9] M. Buehner. Ensemble-derived stationary and flow-dependent background error covariances : evaluation in a quasi-operational setting for NWP. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 131 :1013–1044, 2005.
- [10] A. Conn, N. Gould, and Ph. Toint. *Trust-Region Methods*. MPS-SIAM series on optimizations, 2000.
- [11] A.M. Clayton , A.C. Lorenc and D.M. Barker. Operational implementation of a hybrid ensemble/4D-Var global assimilation system at the Met Office. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 139 :1445–1461, 2013.
- [12] P. Courtier. Dual formulation of four-dimensional variational assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 123 :2449–2461, 1997.
- [13] P. Courtier, J.-N. Thépaut, and A. Hollingsworth. A strategy for operational implementation of 4D-Var using an incremental approach. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 120 :1367–1388, 1994.
- [14] Da Silva A, Pfaendtner J, Guo J, Sienkiewicz M, Cohn S. 1995. Assessing the effects of data selection with DAO's Physical-space Statistical Analysis System. *In Proceedings of the second international WMO symposium on assimilation of observations in meteorology and oceanography*, Tokyo, 13 –17 March 1995. WMO/TD 651, 273 – 278.

- [15] L. Debreu, E. Neveu, E. Simon, F.-X. Le Dimet, and A. Vidard. Multigrid solvers and multigrid preconditioners for the solution of variational data assimilation problems. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 142 :515–528, 2016.
- [16] Derber J, 1989. A variational continuous assimilation technique. *Monthly Weather Review*, **117**, 2437–2446.
- [17] G. Desroziers and L. Berre. Accelerating and parallelizing minimization in ensemble and deterministic variational assimilations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 138 :1599–1610, 2012.
- [18] G. Desroziers, J.-T. Camino and L. Berre. 4DEnVar : link with 4D state formulation of variational assimilation and different possible implementations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140 :2097–2110, 2014.
- [19] G. Evensen. *Data Assimilation. The Ensemble Kalman Filter*. Springer, 2009.
- [20] M. Fisher, S. Gratton, S. Gürol, X. Vasseur, and Y. Trémolet. Low rank updates in preconditioning the saddle point systems arising from data assimilation problems. *Optimization Methods and Software*, 2016.
- [21] M. Fisher and S. Gürol. Parallelisation in the time dimension of four-dimensional variational data assimilation, 2016. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, in press.
- [22] G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, third edition, 1996.
- [23] S. Gratton, S. Gürol, E. Simon and Ph.L. Toint. Issues in making the weakly-constrained 4DVar formulation computationally efficient. *Mathematical and Algorithmic Aspects of Data Assimilation in Geosciences*. Oberwolfach Reports, 2016. DOI : 10.4171/OWR/2016/47.
- [24] S. Gratton, S. Gürol, and Ph.L. Toint. Preconditioning and globalizing conjugate gradients in dual space for quadratically penalized nonlinear-least squares problems. *Computational Optimization and Applications*, pp. 1–25, 2010.
- [25] S. Gratton, S. Gürol, Ph.L. Toint, J. Tshimanga, and A. Weaver. Krylov methods in the observation space for data assimilation. Oberwolfach Reports, 2012.
- [26] S. Gratton, P. Laloyaux and A. Sartenaer. Derivative-free optimization for large-scale nonlinear data assimilation problems. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140 :943–957, 2014.
- [27] S. Gratton, A. Lawless, and N. K. Nichols. Approximate Gauss-Newton methods for nonlinear least-squares problems. *SIAM Journal on Optimization*, 18 :106–132, 2007.
- [28] S. Gratton, M. Rincon-Camacho, E. Simon and Ph.L. Toint. Observation Thinning in Data Assimilation Computations. *EURO Journal on Computational Optimization*, 3 :31–51, 2015.
- [29] S. Gratton, A. Sartenaer, and Ph.L. Toint, Recursive trust-region methods for multi-scale nonlinear optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 19(1) :414–444, 2008.
- [30] S. Gratton, A. Sartenaer, and J. Tshimanga, On a class of limited memory preconditioners for large scale linear systems with multiple right-hand sides. *SIAM Journal on Optimization*, 21 :912–935, 2011.
- [31] S. Gratton, Ph. L. Toint, and J. Tshimanga. Range-space variants and inexact matrix-vector products in Krylov solvers for linear systems arising from inverse problems. *SIAM Journal on Matrix Analysis*, 32(3) :969–986, 2011.
- [32] S. Gratton and J. Tshimanga. An observation-space formulation of variational assimilation using a restricted preconditioned conjugate-gradient algorithm. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 135 :1573–1585, 2009.
- [33] S. Gürol, A. T. Weaver, A. M. Moore, A. Piacentini, H. G. Arango, and S. Gratton. B-preconditioned minimization algorithms for variational data assimilation with the dual formulation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 140(679) :539–556, 2014.

- [34] W. Hackbusch. *Multi-Grid Methods and Applications*. Springer Series in Computational Mathematics, Vol. 4, 2003.
- [35] T.M. Hamill and C. Snyder. A hybrid ensemble Kalman filter-3D variational analysis scheme. *Monthly Weather Review*, 128 :2905–2919, 2000.
- [36] T.M. Hamill, J.S. Whitaker and C. Snyder. Distance-dependent filtering of background error covariance estimates in an ensemble Kalman filter. *Monthly Weather Review*, 128 :2905–2919, 2000.
- [37] Lagarde T, 2000. Nouvelle approche des methodes d’assimilation de données : les algorithmes de point selle. *Ph.D. thesis, Université Paul Sabatier (Toulouse III)*.
- [38] F.-X. Le Dimet and O. Talagrand. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations : theoretical aspects. *Tellus*, 38A :97–110, 1986.
- [39] C. Liu, Q. Xiao and B. Wang. An ensemble-based four-dimensional variational data assimilation scheme, part I : technical formulation and preliminary test. *Monthly Weather Review*, 136 :3363–3373, 2008.
- [40] A.C. Lorenc. Modeling of error covariances by 4D-Var data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 129 :3167–3182, 2003.
- [41] J. Mandel, E.H. Bergou, S. Gürol, S. Gratton and I. Kusanicky. Levenberg-Marquardt and weak constraint ensemble Kalman smoother method. *Nonlinear Processes in Geophysics*, 23 :59–73, 2016.
- [42] E. Neveu, L. Debreu and F.-X. Le Dimet. Multigrid methods and data assimilation, convergence study and first experiments on non-linear equations. *Rev. Afr. Rech. Inform. Math. Appl. (ARIMA)*, 14 :63–80, 2011.
- [43] Rao V and Sandu A, 2016. A time-parallel approach to strong-constraint four-dimensional variational data assimilation. *Journal of Computational Physics*, **313**, 583–593.
- [44] S. Reich, C. Cotter. *Probabilistic Forecasting and Bayesian Data Assimilation*. Cambridge University Press, 2015.
- [45] P. Sakov and L. Bertino. Relation between two common localisation methods for the EnKF. *Computational Geosciences*, 15(2) :225–237, 2011.
- [46] P. Sakov, D.S. Oliver and L. Bertino. An iterative EnKF for strongly nonlinear systems. *Monthly Weather Review*, 140(6) :1988–2004, 2012.
- [47] E. Simon, L. Debreu and E. Blayo. 4D variational data assimilation for locally nested models : complementary theoretical aspects and application to a 2D shallow water model. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 66 :135–161, 2011.
- [48] Y. Trémolet. Accounting for an imperfect model in 4D-Var. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 132(621) :2483–2504, 2006.
- [49] Y. Trémolet. Model-error estimation in 4D-Var. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, 133(626) :1267–1280, 2007.
- [50] J. Tshimanga, S. Gratton, A. Weaver, and A. Sartenaer. Limited-memory preconditioners with application to incremental four-dimensional variational data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*, **134**, 751–769, 2008.
- [51] A. Vidard, E. Blayo, F.-X. Le Dimet, and A. Piacentini. 4D Variational Data Analysis with Imperfect Model. *Journal of Flow, Turbulence and Combustion*, **65 (3)**, 489–504, 2000.
- [52] Vidard P.A, Piacentini A, Le Dimet F.X, 2004. Variational data analysis with control of forecast bias. *Tellus*, **51A**, 177–188.
- [53] D. Zupanski. A general weak constraint applicable to operational 4DVAR data assimilation systems. *Monthly Weather Review*, **125**, 2227–2292, 1997.
- [54] M. Zupanski. Maximum Likelihood Ensemble Filter : Therotical Aspects. *Monthly Weather Review*, **133**, 1710–1726, 2005.