

# Croco-MS3Dvar

P. Marchesiello, **B. Lemieux-Dudon**, L. Renault, F. Dumas et S. Raynaud

Juillet 2023

# Plan

- 1 Introduction
- 2 Projet Croco-MS3Dvar
- 3 Développements et implémentations
- 4 Spécificités de MS-3Dvar
- 5 Conclusion

# Introduction

L'assimilation de données (AD) est un ensemble de techniques permettant d'optimiser les paramètres d'un modèle en utilisant de l'information issue de réseaux d'observation.

Historiquement, l'objectif de l'AD est la correction de la CI pour les modèles de circulation atmosphérique ou océanique. Les objets clés de l'AD sont :

- $\mathbf{x}_b$  : l'état d'*ébauche* du modèle que l'on cherche à "corriger" (*background state*),
- $\mathbf{y}_o$  : l'ensemble des *observations assimilées*,
- $\delta\mathbf{x}$  : l'inconnue à identifier, i.e., la *correction* sur le modèle,
- $\mathbf{B}$  et  $\mathbf{R}$  les covariances d'erreur d'ébauche et d'observation,
- L'état du modèle analysé :

$$\mathbf{x}_a = \mathbf{x}_b + \delta\mathbf{x}_a$$

qui corrige l'état d'ébauche par l'ajout de l'*incrément d'analyse*  $\delta\mathbf{x}_a$

# Projet Croco-MS3Dvar : choix du noyau MS-3Dvar et généralités sur l'AD

Le projet MS3Dvar-Croco est un projet SHOM-IRD qui a pour objectif de doter Croco d'une capacité d'assimilation de données à l'échelle régionale côtière.

MS-3Dvar est le noyau d'AD choisi par le SHOM et l'IRD sur les critères suivants :

- être facilement relocalisable,
- gérer la question des échelles mises en jeu dans les applications régionales côtières,
- être compatibles in fine avec les capacités de nesting Croco AGRIF.

MS-3Dvar a été initialement développé pour ROMS :

- ROMS3DVAR : Li & Chao, McWilliams, Ide, JAOT, 2008a; Li, Chao, McWilliams, Ide, JGR, 2008b

MS-3Dvar met en oeuvre des techniques d'AD de type *variationnelle* (par opposition aux techniques de type *Kalman*). Ces techniques s'appuient sur la définition d'une fonction coût  $J$  :

$$J(\delta \mathbf{x}) = \underbrace{\|\mathbf{x}^b + \delta \mathbf{x} - \mathbf{x}^b\|_{\mathbf{B}-1}^2}_{\text{distance to background state}} + \underbrace{\|\mathbf{H}(\mathbf{x}^b + \delta \mathbf{x}) - \mathbf{y}^o\|_{\mathbf{R}-1}^2}_{\text{distance to observations}}$$

La minimization de  $J(\delta \mathbf{x})$  permet d'estimer une correction  $\delta \mathbf{x}^a$  optimale et de ré-initialiser le modèle avec l'état analysé  $\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \delta \mathbf{x}^a$

## Projet Croco-MS3Dvar : approche multi-échelle

MS-3Dvar été reformulé pour gérer les échelles régionales à côtières, MS signifiant *Multi-Scale* :

- MS-3Dvar : Li, McWilliams, Ide, Farrara, MWR, 2015a; Li, McWilliams, Ide, Farrara, OD, 2015b.

L'approche multi-échelles repose la définition de plusieurs fonctions coûts visant chacune à corriger une gamme d'échelles spatiales. Chaque fonction coût utilise des réseaux d'observations appropriés et des réglages spécifiques pour les erreurs (**B** et **R**).

La minimization de ces fonctions coût s'opère séquentiellement des grandes échelles vers les petites.

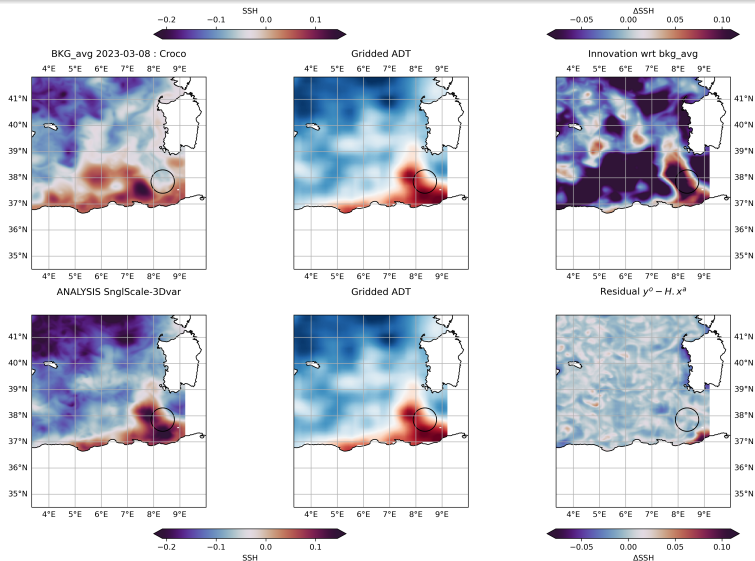
La séparation des échelles utilise un filtre gaussien qui est appliqué sur l'état d'ébauche du modèle. Pour une décomposition à deux niveaux  $L$  et  $S$  :

$$\mathbf{x}_L^b = \mathbf{P}_L \mathbf{x}^b \quad \mathbf{x}_S^b = \mathbf{x}^b - \mathbf{x}_L^b$$

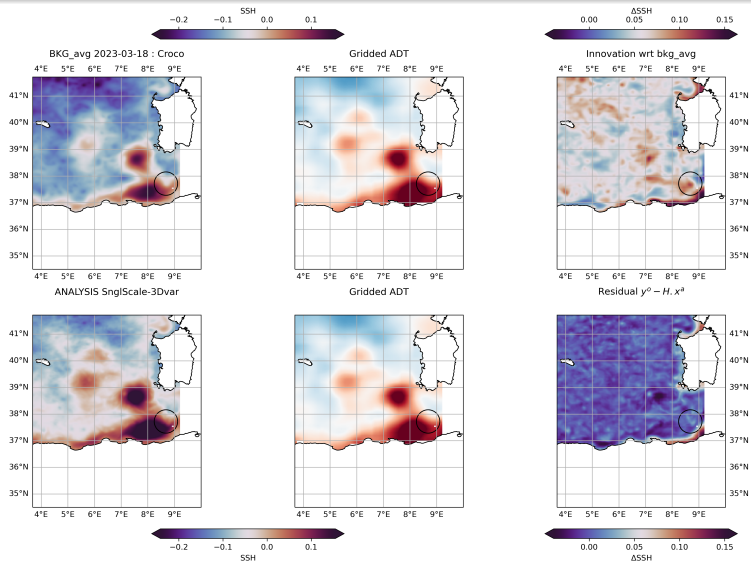
## Projet Croco-MS3Dvar : réalisations depuis janvier 2022

- Mise en place du dépôt croco\_ms3dvar sur le gitlab.inria.fr avec [documentation sphynx](#).
- Adaptation du noyau fortran MS-3Dvar à Croco.
- Développement de [scripts python](#) permettant de construire la matrice **B** (opérateurs univariés de variance et de corrélation d'erreur d'ébauche).
- Mise en oeuvre d'un [premier cas test d'analyse sur la configuration réaliste WMED](#) (Renault et al, JGR, 2020).
- Développement d'un ensemble de [scripts](#) permettant de faire tourner un [prototype d'analyse et de prévision en condition opérationnelle](#).
- [Scripts python](#) qui attaquent les bases de données distantes via [pydap](#) (opendap) pour préparer :
  - les [forçages atmosphériques](#) (GFS) et [aux frontières latérales](#) (CMEMS), les [CI le cas échéant](#) (subsetting, regridding, paramètres bulk,...),
  - les [observations à assimiler](#).
- Développement de [scripts python pour le post-processing](#) :
  - génération automatique d'images pour le monitoring de la prévision,
  - archivage et dépôt automatique sur le ftp anonymous du LEGOS...
- [Production de prévisions journalières depuis début mars 2023 en best-effort](#) avec mise à l'épreuve technique au cours de la campagne en mer WEMSWOT.
- Prototype d'analyse et de prévision contrôlé par un [script bash](#) et un [fichier de configuration python](#) (configobj) offrant une série d'options à l'utilisateur :
  - choix des observations, choix des forçages,...
  - sélection ou non de certaines tâches, avec répétition des requêtes en cas d'échec,
  - mais aussi un mode [réanalyse](#) pour rejouer la production.

# Projet Croco-MS3Dvar : réalisations depuis janvier 2022



# Projet Croco-MS3Dvar : réalisations depuis janvier 2022





## Spécificités MS-3Dvar : un 3DVAR incrémental un peu particulier

Le processus pour estimer la correction sur le modèle est un processus itératif qui nécessite de calculer la fonction coût  $J(\delta \mathbf{x})$  mais aussi son gradient  $\nabla_{\delta \mathbf{x}} J$  :

$$J(\delta \mathbf{x}) = \|\delta \mathbf{x}\|_{\mathbf{B}-1}^2 + \|\mathbf{H} \delta \mathbf{x} - \mathbf{d}^o\|_{\mathbf{R}-1}^2$$

$$\nabla_{\delta \mathbf{x}} J = \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x} + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H} \delta \mathbf{x} - \mathbf{d}^o)$$

Equivalent à :

$$\nabla_{\delta \mathbf{x}} J = \underbrace{(\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})}_{\text{Hessian } \mathcal{H}} \delta \mathbf{x} + \underbrace{-\mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d}^o}_{\text{Initial gradient } \nabla_{\delta \mathbf{x}} J_0}$$

On retrouve :

- l'écart à l'ébauche,
- et l'écart aux observations dans sa version qui fait apparaître l'innovation :

$$\mathbf{d}^o = \mathbf{y}^o - \mathbf{H} \left( \mathbf{x}^b \right)$$

## Spécificités MS-3Dvar : un 3DVAR incrémental un peu particulier

Le processus pour estimer la correction sur le modèle est un processus itératif qui nécessite de calculer la fonction coût  $J(\delta \mathbf{x})$  mais aussi son gradient  $\nabla_{\delta \mathbf{x}} J$  :

$$J(\delta \mathbf{x}) = \|\delta \mathbf{x}\|_{\mathbf{B}}^2 + \|\mathbf{H} \delta \mathbf{x} - \mathbf{d}^o\|_{\mathbf{R}}^2$$

$$\nabla_{\delta \mathbf{x}} J = \mathbf{B}^{-1} \delta \mathbf{x} + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H} \delta \mathbf{x} - \mathbf{d}^o)$$

Equivalent à :

$$\nabla_{\delta \mathbf{x}} J = \underbrace{(\mathbf{B}^{-1} + \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{H})}_{\text{Hessian } \mathcal{H}} \delta \mathbf{x} \quad \underbrace{- \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{d}^o}_{\text{Initial gradient } \nabla_{\delta \mathbf{x}} J_0}$$

On retrouve :

- l'écart à l'ébauche,
- et l'écart aux observations dans sa version qui fait apparaître l'innovation :

$$\mathbf{d}^o = \mathbf{y}^o - \mathbf{H} \left( \mathbf{x}^b \right)$$

Pour MS-3DVAR ,  $\mathbf{H} = \mathbf{H}^T = \mathbf{I}$  (Identity)

## Spécificité du noyau MS-3Dvar

Classiquement, un 3D-var vise à fabriquer un incrément d'analyse  $\delta \mathbf{x}^a$  dans l'espace des paramètres physiques du modèle :

$$\delta \mathbf{x}^T = (\delta T, \delta S, \delta \zeta, \delta u, \delta v)$$

En général, la minimization de la fonction coût ne se fait pas dans l'espace des paramètres physiques mais dans un espace de contrôle :

$$\mathbf{u}^T = (\delta T_{\text{ubal}}, \delta S_{\text{ubal}}, \delta \zeta_{\text{ubal}})$$

en particulier pour avoir un meilleur conditionnement du problème et une convergence plus rapide (*ubal* signifie *unbalanced*, i.e., non-équilibré).

C'est le cas de MS-3Dvar mais avec la **spécificité** de contrôler la fonction de courant  $\delta \psi$  et le potentiel de vitesse  $\delta \chi$  :

$$\mathbf{u}^T = (\delta T_{\text{ubal}}, \delta S_{\text{ubal}}, \delta \zeta_{\text{ubal}}, \delta \psi, \delta \chi)$$

Ceci dans le but de fabriquer un incrément de vitesse agéostrophique décomposé en composantes non-divergente et irrotationnelle.

## 3Dvar : fonction coût dans l'espace de contrôle

On minimise la fonction coût du 3D-Var dans l'espace de contrôle. On passe de l'espace de contrôle à l'espace des paramètres physiques en appliquant sur  $\mathbf{u}$  la matrice de covariance d'erreur d'ébauche  $\mathbf{B}^{1/2}$  :

$$\delta \mathbf{x} = \mathbf{B}^{1/2} \mathbf{u} = \mathbf{K} \mathbf{\Sigma} \mathbf{C}^{1/2} \mathbf{u}$$

$\mathbf{B}^{1/2}$  se décompose en 3 opérateurs :

- $\mathbf{C}^{1/2}$  les corrélations d'erreur d'ébauche univariées,
- $\mathbf{\Sigma}$  les variances d'erreur d'ébauche univariées,
- $\mathbf{K}$  l'opérateur d'équilibre (*balance operator*).

La fonction coût  $J$  et son gradient  $\nabla_{\mathbf{u}} J$  s'écrivent alors dans l'espace de contrôle :

$$J(\mathbf{u}) = \|\mathbf{u}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 + \|\underbrace{\mathbf{H} \mathbf{K} \mathbf{\Sigma} \mathbf{C}^{1/2}}_{\mathbf{B}^{1/2}} \mathbf{u} - \mathbf{d}^0\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2$$

$$\nabla_{\mathbf{u}} J = \mathbf{u} + \underbrace{\mathbf{C}^{T/2} \mathbf{\Sigma}^T \mathbf{K}^T}_{\mathbf{B}^{T/2}} \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} \left( \underbrace{\mathbf{H} \mathbf{K} \mathbf{\Sigma} \mathbf{C}^{1/2}}_{\mathbf{B}^{1/2}} \mathbf{u} - \mathbf{d}^0 \right)$$

## Opérateurs directs et adjoints

- La 1ère itération de minimization de la fonction coût démarre par une correction nulle  $\mathbf{u} = 0 \Rightarrow \delta \mathbf{x} = 0$ .
- Les itérations suivantes consistent à calculer pour la valeur courante de la variable de contrôle  $\mathbf{u}$  :
  - la fonction coût  $J(\mathbf{u})$  qui nécessite l'écart obs-modèle :

$$J(\mathbf{u}) = \|\mathbf{u}\|_{\mathbf{B}^{-1}}^2 + \overbrace{\|\mathbf{H} \mathbf{K} \Sigma \mathbf{C}^{1/2} \mathbf{u} - \mathbf{d}^0\|_{\mathbf{R}^{-1}}^2}^{\text{écart aux obs}}$$

Op. directs

$\Rightarrow$  application des **opérateurs directs** sur  $\mathbf{u}$

- puis le gradient  $\nabla_{\mathbf{u}} J$

$$\nabla_{\mathbf{u}} J = \mathbf{u} + \underbrace{\mathbf{C}^{T/2} \Sigma^T \mathbf{K}^T \mathbf{H}^T}_{\text{Op. adjoints}} \overbrace{\mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H} \mathbf{K} \Sigma \mathbf{C}^{1/2} \mathbf{u} - \mathbf{d}^0)}^{\text{écart aux obs pondéré}}$$

$\Rightarrow$  application des **opérateurs adjoints** sur l'écart aux observations pondéré par les erreurs d'observations.

Dans la suite, on s'intéresse à l'opérateur de *balance*  $\mathbf{K}$ . C'est le seul opérateur qui permette d'induire une correction sur la stratification via une observation d'ADT ou de vitesse. Les autres opérateurs sont univariés (à l'exception de corrélations T-S optionnelles dans MS-3Dvar). Au contraire,  $\mathbf{K}$  fait intervenir des notions d'équilibres **hydrostatique** et **géostrophique**, par essence multivariés.

## Balance operator **K** : MS-3Dvar specificities

$$\begin{matrix} \text{bal} \\ \begin{pmatrix} \delta T \\ \delta S \\ \delta \zeta \\ \delta u \\ \delta v \end{pmatrix} \end{matrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K_{ST} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \textcolor{brown}{K}_{\zeta T} & \textcolor{brown}{K}_{\zeta S} & 1 & 0 & 0 \\ \textcolor{teal}{K}_{uT} & \textcolor{teal}{K}_{uS} & \textcolor{teal}{K}_{u\zeta} & \textcolor{teal}{K}_{u\psi} & \textcolor{teal}{K}_{u\chi} \\ \textcolor{blue}{K}_{vT} & \textcolor{blue}{K}_{vS} & \textcolor{blue}{K}_{v\zeta} & \textcolor{blue}{K}_{v\psi} & \textcolor{blue}{K}_{v\chi} \end{pmatrix} \begin{matrix} \text{ubal} \\ \begin{pmatrix} \delta T_{ubal} \\ \delta S_{ubal} \\ \delta \zeta_{ubal} \\ \delta \psi \\ \delta \chi \end{pmatrix} \end{matrix}$$

### Hydrostatic Balance

$$[\textcolor{brown}{K}_{\zeta T} \quad \textcolor{brown}{K}_{\zeta S}] \Rightarrow \begin{aligned} (\rho_0 + \rho_{\text{surf}}^b) \delta \zeta_{bal} &= - \int_{z_{nml}}^{z_{surf}} \delta \rho(z) dz \\ \delta P_{surface} + \delta P(z_{nml}) &= 0 \end{aligned}$$

### Geostrophic Balance

$$\begin{bmatrix} \textcolor{teal}{K}_{uT} & \textcolor{teal}{K}_{uS} & \textcolor{teal}{K}_{u\zeta} \\ \textcolor{blue}{K}_{vT} & \textcolor{blue}{K}_{vS} & \textcolor{blue}{K}_{v\zeta} \end{bmatrix} \Rightarrow \overrightarrow{V_{geo}} : \begin{aligned} \frac{\delta P(z)}{g} &= \int^z \delta \rho(z') dz' \\ -f \delta v_{geo}(z) &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \delta P(z)}{\partial x} \\ +f \delta u_{geo}(z) &= -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \delta P(z)}{\partial y} \end{aligned}$$

### Ageostrophic velocities

$$\begin{bmatrix} \textcolor{teal}{K}_{u\psi} & \textcolor{teal}{K}_{u\chi} \\ \textcolor{blue}{K}_{v\psi} & \textcolor{blue}{K}_{v\chi} \end{bmatrix} \Rightarrow \overrightarrow{V_{ageo}} : \begin{aligned} \delta u_{ageo} &= -\frac{\partial \delta \psi}{\partial y} + \frac{\partial \delta \chi}{\partial x} \\ \delta v_{ageo} &= \frac{\partial \delta \psi}{\partial x} + \frac{\partial \delta \chi}{\partial y} \end{aligned}$$

## Opérateurs directs et adjoints

L'idée est de comprendre quel type d'observation peut induire une correction sur telle ou telle composante de la variable de contrôle :

- $T/S$ ,
- $\zeta_{\text{ubal}}$  (SSH non-équilibrée),
- $\Psi$  and  $\chi$  (fonction de courant, potentiel de vitesse),

Et de voir comment les incréments dans l'espace de contrôle se répercutent dans l'espace physique :

- $T/S$ ,
- $\zeta = \zeta_{\text{bal}} + \zeta_{\text{ubal}}$ ,
- $\vec{v} = \vec{v}_{\text{geo}} + \vec{v}_{\text{ageo}}$

## Adjoint balance operator $\mathbf{K}^T$ : MS-3Dvar specificities

$$\begin{matrix} \partial_T \mathcal{J} \\ \partial_S \mathcal{J} \\ \partial_\zeta \mathcal{J} \\ \partial_\psi \mathcal{J} \\ \partial_\chi \mathcal{J} \end{matrix} \begin{pmatrix} \delta T^* \\ \delta S^* \\ \delta \zeta^* \\ \delta \psi^* \\ \delta \chi^* \end{pmatrix} \stackrel{\text{adjoint}}{=} \begin{pmatrix} 1 & K_{ST}^T & K_{\zeta T}^T & K_{uT}^T & K_{vT}^T \\ 0 & 1 & K_{\zeta S}^T & K_{uS}^T & K_{vS}^T \\ 0 & 0 & 1 & K_{u\zeta}^T & K_{v\zeta}^T \\ 0 & 0 & 0 & K_{u\psi}^T & K_{v\psi}^T \\ 0 & 0 & 0 & K_{u\chi}^T & K_{v\chi}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{H}^T \mathbf{R}^{-1} (\mathbf{H} \mathbf{B}^{1/2} \mathbf{u} - \mathbf{d}^0) \\ \delta T^{*(p-1)} \\ \delta S^{*(p-1)} \\ \delta \zeta^{*(p-1)} \\ \delta u^* \\ \delta v^* \end{pmatrix}$$

## Non null increments in $\delta\psi$ and $\delta\chi$ requires velocity observations

- Non null increment in the control variable  $\mathbf{u}$  requires non null partial derivative  $\partial_{\mathbf{u}} J$
- Non null partial derivative  $\partial_{\mathbf{u}} J$  requires a non null adjoint variable  $\mathbf{u}^*$  :  $\nabla_{\mathbf{u}} J = \mathbf{u}^*$

$$\begin{bmatrix} \delta \psi^* \\ \delta \chi^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_\psi^{T/2} & 0 \\ 0 & C_\chi^{T/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_\psi^{T/2} & 0 \\ 0 & \Sigma_\chi^{T/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{u\psi}^T & K_{v\psi}^T \\ K_{u\chi}^T & K_{v\chi}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta u^* \\ \delta v^* \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} K_{u\psi}^T & K_{v\psi}^T \\ K_{u\chi}^T & K_{v\chi}^T \end{bmatrix} \Rightarrow \text{only } \mathbf{K}^T \text{ block operator impacting } \partial_\psi \mathcal{J} = \delta \psi^* \text{ and/or } \partial_\chi \mathcal{J} = \delta \chi^*$$



## Balance operator $\mathbf{K}$ : MS-3Dvar specificities

In MS-3Dvar, the dependency between the  $\delta T$  and  $\delta S$  increments (i.e., through the linearized EOS) is not specified within the balance operator  $\mathbf{K}$ , i.e.,  $K_{TS} = 0$  :

$$\begin{matrix} \text{bal} \\ \begin{pmatrix} \delta T \\ \delta S \\ \delta \zeta \\ \delta u \\ \delta v \end{pmatrix} \end{matrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ K_{\zeta T} & K_{\zeta S} & 1 & 0 & 0 \\ K_{uT} & K_{uS} & K_{u\zeta} & K_{u\psi} & K_{u\chi} \\ K_{vT} & K_{vS} & K_{v\zeta} & K_{v\psi} & K_{v\chi} \end{pmatrix} \begin{matrix} \text{ubal} \\ \begin{pmatrix} \delta T_{\text{ubal}} \\ \delta S_{\text{ubal}} \\ \delta \zeta_{\text{ubal}} \\ \delta \psi \\ \delta \chi \end{pmatrix} \end{matrix}$$

However, a T-S multivariate correlation operator  $\rho_{TS}^{1/2}(k, \zeta, \xi)$  can optionally be applied upstream :

$$\begin{bmatrix} \delta T_{\text{ubal}} \\ \delta S_{\text{ubal}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_T & 0 \\ 0 & \Sigma_S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_T^{1/2} & 0 \\ 0 & C_S^{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \rho_{TS}^{1/2} \\ \rho_{TS}^{T/2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta T_{\text{ubal}}^{(p-1)} \\ \delta S_{\text{ubal}}^{(p-1)} \end{bmatrix}$$

Apart from  $\delta T_{\text{ubal}}$  and  $\delta S_{\text{ubal}}$  which can be cross-correlated, the other control vector components, i.e.,  $\delta \zeta_{\text{ubal}}$ ,  $\delta \psi$  and  $\delta \chi$ , are only transformed by univariate correlation operators.

- For the  $\delta \zeta_{\text{ubal}}$  control vector component, the univariate correlation operator (in its cholesky decomposition form) is constructed as the Kronecker product of unidimensional correlation along the  $\xi$ ,  $\zeta$  horizontal dimensions :

$$C_{\mathcal{F}_{2D}}^{1/2} = C_{\xi, \mathcal{F}_{2D}}^{1/2}(\xi, \xi') \otimes C_{\eta, \mathcal{F}_{2D}}^{1/2}(\eta, \eta')$$

- For the other 3D control vector components, the univariate correlation operator (in its cholesky decomposition form) is constructed as the Kronecker product of unidimensional correlation along the horizontal and vertical dimensions (k):

$$C_{\mathcal{F}_{3D}}^{1/2} = C_{\xi, \mathcal{F}_{3D}}^{1/2}(\xi, \xi') \otimes C_{\eta, \mathcal{F}_{3D}}^{1/2}(\eta, \eta') \otimes C_{k, \mathcal{F}_{3D}}^{1/2}(k, k')$$

# Conclusion

Beaucoup de travail encore...

- rejeu de la production pour affiner les réglages du système,
- transformer le système actuel pour gérer le multi-échelle,
- mettre en place une stratégie pour faire évoluer les sources MS-3Dvar de conserve avec Croco.
- ...