Université de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Oc®an, Atmosph¯re et surfaces continentales

Présentée et soutenue par :

M. BENJAMIN MENETRIER

le jeudi 3 juillet 2014

Titre :

UTILISATION D'UNE ASSIMILATION D'ENSEMBLE POUR MODELISER DES COVARIANCES D'ERREUR D'EBAUCHE DEPENDANTES DE LA SITUATION METEOROLOGIQUE A ECHELLE CONVECTIVE

Ecole doctorale :

Sciences de l'Univers de l'Environnement et de l'Espace (SDU2E)

Unité de recherche :

Centre National de Recherches M®t®orologiques (CNRM)

Directeur(s) de Thèse :

M. THIBAUT MONTMERLE

Rapporteurs :

M. ANDREW LORENC, MET OFFICE

M. MARC BOCQUET, ECOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSEE

Membre(s) du jury :

M. SERGE GRATTON, INP TOULOUSE, Pr®sident

M. LOIK BERRE, CENTRE NATIONAL RECHERCHE METEOROLOGIQUE, Membre

M. THIBAUT MONTMERLE, CENTRE NATIONAL RECHERCHE METEOROLOGIQUE, Membre

M. THOMAS AULIGNE, UCAR, Membre

M. YANN MICHEL, CENTRE NATIONAL RECHERCHE METEOROLOGIQUE, Membre

Remerciements

Je tiens à remercier Thibaut Montmerle, mon directeur de thèse, ainsi que Yann Michel et Loïk Berre, qui m'ont co-encadré pendant ces quatre années. Par la quantité et surtout la qualité de nos échanges, comme par la liberté de travail qu'ils m'ont accordée, ils m'ont permis d'avancer efficacement et sereinement tout au long de cette aventure scientifique et technique.

Je souhaite aussi remercier les membres de mon comité de thèse, Anthony Weaver et François Bouttier, pour leurs conseils avisés quant à la conduite de mes travaux. Je remercie également Thomas Auligné et le NCAR de m'avoir accueilli pour une visite très prolifique à l'automne 2013.

Pour son soutien sans faille comme pour sa convivialité légendaire, j'adresse toute ma gratitude à l'équipe du GMAP, au contact de laquelle j'ai beaucoup appris. Merci en particulier à tous les jeunes du GMAP et de la DCLIM pour ces quatre années de Sodexo, de Cougar Break et de soirées toujours très agréables.

Je remercie enfin tous ceux qui m'ont entouré avant et pendant cette thèse, et qui ont tous contribué à son aboutissement. À ma famille, qui m'a toujours soutenu et encouragé, à mes amis, le sel de la vie, et à tous les enseignants qui sont parvenus à me transmettre leur curiosité pour le monde qui nous entoure, je vous suis pleinement reconnaissant.

Pour finir, merci à Cougar, Yuki, Beaufix et Prolix, qui, malgré leurs faiblesses passagères, se sont révélés indispensables aux travaux de cette thèse.

Résumé

L'assimilation de données vise à fournir aux modèles de prévision numérique du temps un état initial de l'atmosphère le plus précis possible. Pour cela, elle utilise deux sources d'information principales : des observations et une prévision récente appelée "ébauche", toutes deux entachées d'erreurs. La distribution de ces erreurs permet d'attribuer un poids relatif à chaque source d'information, selon la confiance que l'on peut lui accorder, d'où l'importance de pouvoir estimer précisément les covariances de l'erreur d'ébauche. Les méthodes de type Monte-Carlo, qui échantillonnent ces covariances à partir d'un ensemble de prévisions perturbées, sont considérées comme les plus efficaces à l'heure actuelle. Cependant, leur coût de calcul considérable limite *de facto* la taille de l'ensemble. Les covariances ainsi estimées sont donc contaminées par un bruit d'échantillonnage, qu'il est nécessaire de filtrer avant toute utilisation. Cette thèse propose des méthodes de filtrage du bruit d'échantillonnage dans les covariances d'erreur d'ébauche pour le modèle à échelle convective AROME de Météo-France.

Le premier objectif a consisté à documenter la structure des covariances d'erreur d'ébauche pour le modèle AROME. Une assimilation d'ensemble de grande taille a permis de caractériser la nature fortement hétérogène et anisotrope de ces covariances, liée au relief, à la densité des observations assimilées, à l'influence du modèle coupleur, ainsi qu'à la dynamique atmosphérique. En comparant les covariances estimées par deux ensembles indépendants de tailles très différentes, le bruit d'échantillonnage a pu être décrit et quantifié.

Pour réduire ce bruit d'échantillonnage, deux méthodes ont été développées historiquement, de façon distincte : le filtrage spatial des variances et la localisation des covariances. On montre dans cette thèse que ces méthodes peuvent être comprises comme deux applications directes du filtrage linéaire des covariances. L'existence de critères d'optimalité spécifiques au filtrage linéaire de covariances est démontrée dans une seconde partie du travail. Ces critères présentent l'avantage de n'impliquer que des grandeurs pouvant être estimées de façon robuste à partir de l'ensemble. Ils restent très généraux et l'hypothèse d'ergodicité nécessaire à leur estimation n'est requise qu'en dernière étape. Ils permettent de proposer des algorithmes objectifs de filtrage des variances et pour la localisation des covariances.

Après un premier test concluant dans un cadre idéalisé, ces nouvelles méthodes ont ensuite été évaluées grâce à l'ensemble AROME. On a pu montrer que les critères d'optimalité pour le filtrage homogène des variances donnaient de très bons résultats, en particulier le critère prenant en compte la non-gaussianité de l'ensemble. La transposition de ces critères à un filtrage hétérogène a permis une légère amélioration des performances, à un coût de calcul plus élevé cependant. Une extension de la méthode a ensuite été proposée pour les composantes du tenseur de la hessienne des corrélations locales. Enfin, les fonctions de localisation horizontale et verticale ont pu être diagnostiquées, uniquement à partir de l'ensemble. Elles ont montré des variations cohérentes selon la variable et le niveau concernés, et selon la taille de l'ensemble.

Dans une dernière partie, on a évalué l'influence de l'utilisation de variances hétérogènes dans le modèle de covariances d'erreur d'ébauche d'AROME, à la fois sur la structure des covariances modélisées et sur les scores des prévisions. Le manque de réalisme des covariances modélisées et l'absence d'impact positif pour les prévisions soulèvent des questions sur une telle approche. Les méthodes de filtrage développées au cours de cette thèse pourraient toutefois mener à d'autres applications fructueuses au sein d'approches hybrides de type EnVar, qui constituent une voie prometteuse dans un contexte d'augmentation de la puissance de calcul disponible.

Abstract

Data assimilation aims at providing an initial state as accurate as possible for numerical weather prediction models, using two main sources of information : observations and a recent forecast called the “background”. Both are affected by systematic and random errors. The precise estimation of the distribution of these errors is crucial for the performance of data assimilation. In particular, background error covariances can be estimated by Monte-Carlo methods, which sample from an ensemble of perturbed forecasts. Because of computational costs, the ensemble size is much smaller than the dimension of the error covariances, and statistics estimated in this way are spoiled with sampling noise. Filtering is necessary before any further use. This thesis proposes methods to filter the sampling noise of forecast error covariances. The final goal is to improve the background error covariances of the convective scale model AROME of Météo-France.

The first goal is to document the structure of background error covariances for AROME. A large ensemble data assimilation is set up for this purpose. It allows to finely characterize the highly heterogeneous and anisotropic nature of covariances. These covariances are strongly influenced by the topography, by the density of assimilated observations, by the influence of the coupling model, and also by the atmospheric dynamics. The comparison of the covariances estimated from two independent ensembles of very different sizes gives a description and quantification of the sampling noise.

To damp this sampling noise, two methods have been historically developed in the community : spatial filtering of variances and localization of covariances. We show in this thesis that these methods can be understood as two direct applications of the theory of linear filtering of covariances. The existence of specific optimality criteria for the linear filtering of covariances is demonstrated in the second part of this work. These criteria have the advantage of involving quantities that can be robustly estimated from the ensemble only. They are fully general and the ergodicity assumption that is necessary to their estimation is required in the last step only. They allow the variance filtering and the covariance localization to be objectively determined.

These new methods are first illustrated in an idealized framework. They are then evaluated with various metrics, thanks to the large ensemble of AROME forecasts. It is shown that optimality criteria for the homogeneous filtering of variances yields very good results, particularly with the criterion taking the non-gaussianity of the ensemble into account. The transposition of these criteria to a heterogeneous filtering slightly improves performances, yet at a higher computational cost. An extension of the method is proposed for the components of the local correlation hessian tensor. Finally, horizontal and vertical localization functions are diagnosed from the ensemble itself. They show consistent variations depending on the considered variable and level, and on the ensemble size.

Lastly, the influence of using heterogeneous variances into the background error covariances model of AROME is evaluated. We focus first on the description of the modelled covariances using these variances and then on forecast scores. The lack of realism of the modelled covariances and the negative impact on scores raise questions about such an approach. However, the filtering methods developed in this thesis are general. They are likely to lead to other prolific applications within the framework of hybrid approaches, which are a promising way in a context of growing computational resources.

Table des matières

Introduction **14**

1 Assimilation de données : théorie et intérêt des méthodes d'ensemble **17**
1.1 Approche séquentielle 18
1.2 Approche variationnelle 21
1.3 Covariances d'erreur d'ébauche 25
1.4 Méthodes d'ensemble 28

2 Diagnostic des covariances d'erreur d'ébauche à l'échelle convective **35**
2.1 Assimilation d'ensemble avec le modèle AROME 35
2.2 Spécificités de l'erreur d'ébauche à échelle convective 44

3 Théorie du filtrage linéaire optimal des covariances **57**
3.1 Estimation de moments centrés : théorie et pratique 57
3.2 Théorie du filtrage linéaire optimal 62
3.3 Critères de filtrage linéaire optimal des covariances 67

4 Applications des critères de filtrage linéaire optimal des covariances **73**
4.1 Filtrage des variances 73
4.2 Localisation des covariances 76
4.3 Illustration dans un cadre idéalisé 81

5 Filtrage des covariances d'erreur d'ébauche à l'échelle convective **91**
5.1 Filtrage des variances 91
5.2 Filtrage des tenseurs LCH 108
5.3 Localisation des covariances 116

6 Utilisation des variances filtrées dans le 3D-Var d'AROME **123**
6.1 Diagnostic des covariances d'erreur d'ébauche modélisées 123
6.2 Test d'impact sur une longue période 135
6.3 Conclusions 152

Conclusions et perspectives **157**

A Annexes **159**
A.1 Tenseurs de la hessienne de la corrélation locale (LCH) 159
A.2 Estimation des moments centrés : théorie et pratique 164
A.3 Théorie du filtrage linéaire optimal 171
A.4 Filtrage linéaire optimal des covariances 173
A.5 Longueur de portée d'une fonction hypergaussienne 177
A.6 Propriétés de l'inflation estimée 178

Introduction

> *"Le calcul des probabilités est une science mathématique tout aussi rigoureuse que la géométrie, l'algèbre ou l'analyse. Il ne faut pas confondre cette science avec les déductions qui peuvent en être faites par application du modèle probabiliste à l'Univers dans lequel nous vivons. [...] De la même façon qu'il n'est pas possible de prouver un axiome, il est, sans doute, impossible de prouver ou d'infirmer logiquement le fait que les probabilités existent ailleurs que dans l'esprit des mathématiciens. Par contre, il est possible d'observer l'adéquation du modèle à un grand nombre de phénomènes, et de lui fournir ainsi une validation empirique."*
>
> – Paul Deheuvels (1982)

La dynamique de l'atmosphère peut être décrite dans l'approximation des milieux continus par les équations de Navier-Stokes, un jeu d'équations aux dérivées partielles. Malheureusement, la solution générale de ces équations - si elle existe - n'est pas connue. Utiliser ces équations pour prévoir l'évolution de l'atmosphère nécessite donc une première étape de discrétisation spatio-temporelle, à l'issue de laquelle on obtient un jeu d'équations algébriques discrètes. L'étape suivante consiste à choisir les résolutions spatiale et temporelle de la discrétisation, qui doivent vérifier certaines conditions (de type CFL) pour assurer la stabilité du schéma numérique. Les phénomènes physiques d'importance ayant lieu à une échelle inférieure à la résolution spatiale doivent être pris en compte à l'aide de paramétrisations physiques. Les forçages extérieurs et les conditions aux limites du domaine doivent également être spécifiés. Il est alors possible d'intégrer progressivement le jeu d'équations discrètes à partir d'un état initial.

La qualité de cette prévision dépend ainsi de nombreux facteurs, et l'erreur commise peut être scindée en deux composantes. La première est liée au modèle de prévision : validité des approximations menant au jeu d'équations aux dérivées partielles, précision du schéma numérique, résolution spatiale et temporelle de la discrétisation, pertinence des paramétrisations, exactitude des forçages et des conditions aux limites prescrits, etc. La seconde est liée à l'erreur de l'état initial. Le caractère chaotique de certains systèmes dynamiques a été découvert par Poincaré à la fin du XIX$^{\text{ème}}$ siècle, et étendu à la dynamique atmosphérique depuis les travaux de Lorenz (1963). Cela signifie que même dans l'hypothèse irréaliste où le modèle de prévision est parfait (pas d'erreur liée au modèle) et où seul l'état initial est contaminé par une erreur, celle-ci connaît une croissance exponentielle au cours de l'intégration du modèle. La prédictibilité de l'atmosphère est donc théoriquement limitée. Dans la réalité, des erreurs ont lieu à toutes les étapes de la conception du modèle et de sa mise en pratique. La sensibilité aux conditions initiales n'en reste pas moins un facteur crucial pour la qualité des prévisions (Simmons et Hollingsworth, 2002).

L'assimilation de données est un ensemble de méthodes dont l'objectif est de fournir aux modèles de prévision numérique un état initial (appelé analyse) le plus précis possible. Pour cela, elle tente de combiner des informations imparfaites et lacunaires : une ébauche de l'état initial, des observations, une trajectoire donnée par le modèle de prévision, etc. Dans ses développements depuis la fin du XXème siècle, elle utilise un formalisme bayésien reposant sur la théorie de l'estimation, qui rend nécessaire de considérer les erreurs entachant ces informations comme des variables aléatoires. Cette étape dans le raisonnement, certes systématique dans

les méthodes actuelles, ne va pas de soi. Au lieu de considérer chaque information telle quelle, on suppose qu'il s'agit d'une réalisation unique d'un processus aléatoire hypothétique. Cette démarche est injustifiable au sens de Deheuvels (1982) cité en exergue, il s'agit bien d'un acte de foi, dont la seule justification *a posteriori* est pragmatique : ce formalisme probabiliste est-il efficace pour fournir une analyse précise ? Le succès des méthodes d'assimilation de données basées sur cette hypothèse a répondu positivement à cette question.

Si l'on accepte donc de considérer les erreurs relatives aux informations entrant dans le système d'assimilation comme des réalisations de processus aléatoires, on se heurte à un second écueil : comment évaluer les distributions des erreurs, nécessaires en théorie de l'estimation ? En effet, comme l'expliquent Bishop et Satterfield (2012), les distributions de ces processus aléatoires suivent une dynamique chaotique non périodique conditionnée par l'écoulement et par les réseaux d'observation passés et présents. Ces processus aléatoires hypothétiques, contingents à un état du système qui ne se reproduit pas, ne génèrent en toute rigueur qu'une seule et unique réalisation pour chaque état du système.

Dans le cadre d'une dynamique linéaire, le filtre de Kalman (1960) propose une méthode séquentielle donnant à la fois une solution pour l'ébauche et l'analyse, et pour leurs covariances d'erreur respectives. Elle permet d'obtenir des covariances d'erreur dépendantes de l'écoulement, ce qui semble plus pertinent que des modèles de covariances statiques, très souvent employés. Une limite de ce filtre concerne le calcul explicite de la propagation des covariances d'erreur d'ébauche, très coûteux pour des systèmes de grande taille. Une solution très utilisée consiste à simuler cette propagation en échantillonnant les matrices d'erreur d'ébauche par une méthode de Monte-Carlo, ce qui constitue un filtre de Kalman d'ensemble (EnKF, Evensen (1994, 2003)). En perturbant explicitement les observations et le modèle utilisés, on peut obtenir un ensemble d'ébauches et d'analyses perturbées qui échantillonnent leurs covariances respectives. Ce type de méthode a connu un développement foisonnant dans les algorithmes d'assimilation de données les plus récents. Les covariances d'erreur d'ébauche et d'analyse ainsi estimées sont toutefois entachées de deux types d'erreur : une erreur systématique liée, à la manière de générer l'échantillon en perturbant les observations et le modèle, et une erreur d'échantillonnage, liée à la taille très limitée de l'échantillon accessible par rapport à la dimension du modèle de prévision, principalement à cause du coût de calcul important de ces prévisions perturbées. La première partie de cette thèse rappelle les bases théoriques de l'assimilation de données en météorologie, en insistant particulièrement sur la modélisation des covariances d'erreur d'ébauche et sur leur estimation par ces méthodes d'ensemble.

L'assimilation de données pour des modèles à échelle convective diffère nettement de celle pour des modèles de résolution plus lâche. D'une part les phénomènes d'intérêt sont différents et font intervenir des paramétrisations fortement non linéaires (ex. : orages, brouillard), et d'autre part le plus grand réalisme des phénomènes simulés permet la prise en compte de nouvelles observations, notamment celles liées aux nuages et aux précipitations (ex : observations radar). L'assimilation de données pour les modèles à échelle convective est donc un sujet en soi. Le modèle à échelle convective AROME, opérationnel à Météo-France depuis décembre 2008, utilise jusqu'à présent un modèle de covariances d'erreur d'ébauche climatologique et homogène sur le domaine. Plusieurs études ont montré qu'une telle représentation engendrait une utilisation parfois largement sous-optimale des observations dans le système, notamment lorsque ces dernières sont effectuées au sein de phénomènes météorologiques sous-échantillonnés dans l'ensemble des prévisions ayant permis sa calibration. Les événements de précipitation intense étant une des cibles principales d'AROME, on s'y intéressera plus spécialement en traitant des cas d'étude relevés par la campagne "Hydrological cycle in Mediterranean Experiment" (Hy-

MeX). La seconde partie de la thèse est ainsi consacrée au diagnostic des covariances d'erreur d'ébauche estimées à partir d'une assimilation d'ensemble conduite avec le modèle AROME, et comparées à celles du modèle global ARPEGE, également opérationnel à Météo-France. Un ensemble de grande taille permet de quantifier précisément d'une part les variances et d'autre part la forme des fonctions de corrélation à leur origine. Ces deux diagnostics sont conduits pour des covariances estimées à partir d'ensembles de grande et de petite taille, afin d'évaluer les effets du sous-échantillonnage qui se manifestent lorsque la taille de l'ensemble diminue.

Pour réduire cette erreur d'échantillonnage, plusieurs méthodes ont été développées historiquement, par des communautés distinctes. En ce qui concerne les variances uniquement (termes diagonaux de la matrice de covariance), Berre *et al.* (2007) ont montré qu'il était possible de réduire le bruit d'échantillonnage par un filtrage spatial, qui tient compte des caractéristiques spatiales du signal et du bruit en jeu. Cette approche peut aussi être vue comme un moyennage spatial local, ce qui revient à une augmentation de la taille d'ensemble sous une hypothèse d'ergodicité spatiale. Cette technique est d'autant plus efficace que l'échelle du bruit d'échantillonnage est réduite par rapport à celle des variances non bruitées, comme l'ont ensuite montré Raynaud *et al.* (2008). Enfin, Raynaud *et al.* (2009) ont approfondi les bases théoriques d'une estimation objective d'un filtrage spectral des variances, en explicitant le lien entre le bruit d'échantillonnage et les covariances d'erreur d'ébauche du système. Les variances ainsi filtrées sont généralement introduites dans un modèle de covariance d'erreur d'ébauche préétabli, qui est donc partiellement climatologique et partiellement déterminé par l'ensemble. Une autre voie a été suivie par les praticiens du filtre de Kalman d'ensemble et de ses dérivés, qui se base sur un ensemble pour estimer des covariances complètes. Ils ont remarqué que le bruit d'échantillonnage affectait particulièrement les covariances à longue portée. La solution retenue a consisté en une "localisation" des covariances, c'est-à-dire une multiplication de celles-ci par une fonction décroissante avec la distance, et s'annulant à grande séparation (Houtekamer et Mitchell, 2001). Spécifiée au départ de façon empirique, cette fonction de localisation a été l'objet de nombreuses études visant à pouvoir la déterminer objectivement (Anderson, 2007; Bishop et Hodyss, 2007, 2009a,b; Anderson et Lei, 2013).

L'option retenue dans cette thèse consiste à considérer le filtrage des variances et la localisation des covariances comme deux aspects d'une même approche, cherchant à réduire le bruit d'échantillonnage sur les covariances estimées par un filtrage linéaire. Or, la théorie du filtrage linéaire optimal - proche cousine de celle de l'estimation - est bien connue. Une de ses hypothèses de base est que le signal "vrai" (ici les covariances asymptotiques qui seraient estimées avec un ensemble de taille infinie) et le bruit à filtrer (ici le bruit d'échantillonnage) sont des réalisations de processus aléatoires, dont on doit connaître les distributions. Comment estimer alors ces distributions alors qu'une seule et unique réalisation du processus aléatoire hypothétique a lieu pour chaque état du système ?

La réponse apportée par cette thèse consiste à développer des critères de filtrage optimal des covariances. Le premier avantage est de n'impliquer que des grandeurs estimables de façon robuste à partir de l'ensemble. Le second est de ne recourir à une hypothèse d'ergodicité qu'en dernière étape, ce qui permet d'adapter le filtrage à l'application visée. La troisième partie de cette thèse en constitue le cœur théorique en matière de filtrage des covariances estimées par un ensemble. La démonstration y est faite de l'équivalence entre la définition d'un filtre linéaire optimal et la vérification de critères d'optimalité. Dans la quatrième partie, on montre qu'il est possible d'obtenir des algorithmes de filtrage des variances et de diagnostic des fonctions de localisation des covariances à partir des mêmes critères généraux développés précédemment. La cinquième partie concerne l'évaluation de ces applications avec l'ensemble

AROME décrit dans la seconde partie. Cet ensemble de grande taille sert de référence pour calculer objectivement la réduction de l'erreur d'échantillonnage pour des ensembles plus petits, fournissant une évaluation objective de la théorie développée dans les chapitres précédents.

À l'échelle globale, le modèle ARPEGE utilise dans son modèle de covariances hétérogènes des variances du jour, estimées à partir d'une assimilation d'ensemble de petite taille (AEARP) puis filtrées. Une piste analogue pour améliorer le modèle de covariances d'AROME consiste donc à introduire des variances hétérogènes du jour calculées par une assimilation d'ensemble dédiée. Dans la sixième et dernière partie, on se penche donc sur les effets du filtrage des variances dans la modélisation opérationnelle des covariances pour AROME. Un ensemble de taille réduite a été conduit pendant une longue période, recouvrant en partie la première période d'observation spéciale de la campagne HyMeX. Il a permis d'évaluer l'apport d'une assimilation d'ensemble pour rendre les covariances d'erreur d'ébauche dépendantes de la situation météorologique à échelle convective dans le 3D-Var AROME.

1 | Assimilation de données : théorie et intérêt des méthodes d'ensemble

On rappelle dans ce chapitre les bases théoriques de l'assimilation de données. L'accent est porté sur les covariances d'erreur d'ébauche, leur rôle, leurs caractéristiques, leur modélisation et leur estimation par des méthodes d'ensemble.

Sommaire

1.1	**Approche séquentielle**	**18**
1.1.1	Principe et hypothèses	18
1.1.2	Étape d'analyse : le BLUE	18
1.1.3	Filtre de Kalman	19
1.1.4	Filtre de Kalman étendu	20
1.2	**Approche variationnelle**	**21**
1.2.1	Méthode du maximum de vraisemblance	21
1.2.2	4D-Var / 3D-Var	21
1.2.3	Méthode incrémentale	23
1.2.4	Préconditionnement de la minimisation	24
1.3	**Covariances d'erreur d'ébauche**	**25**
1.3.1	Impact sur l'incrément d'analyse	25
1.3.2	Caractéristiques générales de la matrice $\mathbf{B}$	26
1.3.3	Modélisation de la matrice $\mathbf{B}$	27
1.4	**Méthodes d'ensemble**	**28**
1.4.1	Intérêt général	28
1.4.2	Typologie des méthodes d'ensemble	29
1.4.3	Exemples d'algorithmes	30

Notations

On définit un laps de temps appelé "fenêtre d'assimilation", durant lequel des observations sont disponibles à différents instants t_0 à $t_\mathcal{T}$. On suppose que l'état "vrai" de l'atmosphère peut être représenté sur la grille du modèle à chaque instant t_τ par un vecteur d'état $\mathbf{x}^t_\tau$ de taille n, appelé "vérité". L'analyse $\mathbf{x}^a_\tau$ est une estimation de $\mathbf{x}^t_\tau$, déterminée en connaissant :

- une ébauche valide à l'instant t_0, donnée par le vecteur d'état $\mathbf{x}^b_0$,
- des observations à chaque instant t_τ, rassemblées dans des vecteurs $\mathbf{y}^o_\tau$.

On dispose également de deux types d'opérateurs :

- le modèle de prévision $M_{\tau+1}$ permettant de propager le vecteur d'état entre les instants t_τ et $t_{\tau+1}$,
- l'opérateur d'observation H_τ permettant de simuler $\mathbf{y}^o_\tau$ à partir de $\mathbf{x}^t_\tau$.

Cependant, l'ébauche, les observations, le modèle et l'opérateur d'observation sont entachés d'erreurs additives, considérées comme des variables aléatoires :

— l'erreur d'ébauche : $\boldsymbol{\varepsilon}^b = \mathbf{x}^b - \mathbf{x}^t_0$
— l'erreur de modèle : $\boldsymbol{\varepsilon}^m_{\tau+1} = \mathbf{x}^t_{\tau+1} - M_{\tau+1}(\mathbf{x}^t_\tau)$
— l'erreur d'observation (incluant les erreurs de mesure, de représentativité et de l'opérateur d'observation) : $\boldsymbol{\varepsilon}^o_\tau = \mathbf{y}^o_\tau - H_\tau(\mathbf{x}^t_\tau)$

Par conséquent, l'analyse $\mathbf{x}^a_\tau$ est elle aussi entachée d'une erreur d'analyse : $\boldsymbol{\varepsilon}^a_\tau = \mathbf{x}^a_\tau - \mathbf{x}^t_\tau$.

Les matrices de covariance des différentes erreurs sont notées :

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^b \boldsymbol{\varepsilon}^{b\mathrm{T}}] = \mathbf{B} \tag{1.1a}$$
$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^m_\tau \boldsymbol{\varepsilon}^{m\mathrm{T}}_\tau] = \mathbf{Q}_\tau \tag{1.1b}$$
$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^o_\tau \boldsymbol{\varepsilon}^{o\mathrm{T}}_\tau] = \mathbf{R}_\tau \tag{1.1c}$$
$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^a_\tau \boldsymbol{\varepsilon}^{a\mathrm{T}}_\tau] = \mathbf{A}_\tau \tag{1.1d}$$

où $\mathbb{E}$ désigne l'espérance mathématique et T la transposée.

1.1. Approche séquentielle

1.1.1. Principe et hypothèses

Dans l'approche séquentielle, les analyses $\mathbf{x}^a_\tau$ sont calculées successivement, en assimilant les observations $\mathbf{y}^o_\tau$ pour corriger des ébauches intermédiaires $\mathbf{x}^b_\tau$ données par :

— l'ébauche $\mathbf{x}^b$ à l'instant t_0,
— la prévision $M_\tau(\mathbf{x}^a_{s-1})$ à l'instant t_τ pour $\tau > 0$.

Ceci suppose implicitement que les erreurs d'ébauche, modèle et d'observation ayant lieu à différents instants sont décorrélées. On suppose en outre que les erreurs de nature différente sont décorrélées :

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^b \boldsymbol{\varepsilon}^{m\mathrm{T}}_\tau] = 0 \tag{1.2a}$$
$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^o_\tau \boldsymbol{\varepsilon}^{m\mathrm{T}}_\tau] = 0 \tag{1.2b}$$
$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^b \boldsymbol{\varepsilon}^{o\mathrm{T}}_\tau] = 0 \tag{1.2c}$$

et qu'elles sont sans biais :

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^b] = 0 \tag{1.3a}$$
$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^m_\tau] = 0 \tag{1.3b}$$
$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}^o_\tau] = 0 \tag{1.3c}$$

En réalité, les hypothèses 1.2b et 1.2c ne sont pas nécessaires, car elles peuvent être validées grâce à un changement de variable adéquat (Talagrand, 1999; Tarantola, 2005).

1.1.2. Étape d'analyse : le BLUE

Pour simplifier les notations, l'indice τ indiquant l'instant d'observation est omis dans cette section.

On fait l'hypothèse que l'opérateur d'observation H est linéaire et noté $\mathbf{H}$, et on cherche

à exprimer l'analyse comme combinaison linéaire des deux sources d'information :

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{L}\mathbf{x}^b + \mathbf{K}\mathbf{y}^o \tag{1.4}$$

où $\mathbf{L}$ et $\mathbf{K}$ sont deux matrices de tailles $n \times n$ et $n \times p$ respectivement. L'erreur d'analyse peut être déduite de l'équation précédente :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^a = \mathbf{L}\boldsymbol{\varepsilon}^b + \mathbf{K}\boldsymbol{\varepsilon}^o + (\mathbf{L} + \mathbf{K}\mathbf{H} - \mathbf{I})\mathbf{x}^t \tag{1.5}$$

où $\mathbf{I}$ est la matrice identité. On souhaite que l'erreur d'analyse soit sans biais, ce qui impose $\mathbf{L} + \mathbf{K}\mathbf{H} - \mathbf{I} = 0$, car les erreurs d'ébauche et d'observation sont également sans biais. Comme ces erreurs sont aussi décorrélées (équation 1.2c), la matrice de covariance de l'erreur d'analyse peut s'écrire :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{B}(\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})^{\mathrm{T}} + \mathbf{K}\mathbf{R}\mathbf{K}^{\mathrm{T}} \tag{1.6}$$

On souhaite optimiser l'analyse, dans le sens où la norme euclidienne de $\boldsymbol{\varepsilon}^a$ au carré (égale à la trace de $\mathbf{A}$) soit minimum. Pour une variation $\delta\mathbf{K}$ de l'opérateur $\mathbf{K}$, la variation de la trace de $\mathbf{A}$ vaut :

$$\begin{aligned}\delta \operatorname{Tr}(\mathbf{A}) &= \operatorname{Tr}\Big(- (\delta\mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{B}(\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})^{\mathrm{T}} - (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{B}(\delta\mathbf{K}\mathbf{H})^{\mathrm{T}} + \delta\mathbf{K}\mathbf{R}\mathbf{K}^{\mathrm{T}} + \mathbf{K}\mathbf{R}\delta\mathbf{K}^{\mathrm{T}}\Big) \\ &= 2 \operatorname{Tr}\bigg(\Big(- (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{K}\mathbf{R}\Big)\delta\mathbf{K}^{\mathrm{T}}\bigg)\end{aligned} \tag{1.7}$$

car $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$ sont des matrices symétriques, et car la trace d'une matrice est la même que celle de sa transposée. Cette variation s'annule pour $\delta\mathbf{K} \neq 0$ si et seulement si :

$$\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R})^{-1} \tag{1.8}$$

qui est alors appelé gain optimal. On note que dans ce cas, la matrice de covariance d'analyse (équation 1.6) se simplifie en :

$$\mathbf{A} = (\mathbf{I} - \mathbf{K}\mathbf{H})\mathbf{B} \tag{1.9}$$

L'analyse obtenue est de la forme :

$$\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^b + \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R})^{-1}(\mathbf{y}^o - \mathbf{H}\mathbf{x}^b) \tag{1.10}$$

Cette analyse est linéaire, sans biais, et optimale au sens susmentionné. Il s'agit d'une extension multivariée du théorème de Gauss-Markov, communément appelée BLUE (Best Linear Unbiased Estimation), qui fait suite aux travaux initiaux de Aitken (1935).

1.1.3. Filtre de Kalman

On suppose que le modèle de prévision M_τ est linéaire et noté $\mathbf{M}_\tau$, son adjoint $\mathbf{M}_\tau^{\mathrm{T}}$. Partant d'une ébauche initiale $\mathbf{x}_0^b$, l'analyse et la prévision sont donc cyclées pour $\tau \geq 0$ par :

$$\mathbf{x}_\tau^a = \mathbf{x}_\tau^b + \mathbf{K}_\tau(\mathbf{y}_\tau^o - \mathbf{H}_\tau\mathbf{x}_\tau^b) \tag{1.11a}$$

$$\mathbf{x}_{\tau+1}^b = \mathbf{M}_{\tau+1}\mathbf{x}_\tau^a \tag{1.11b}$$

Les erreurs d'analyse et d'ébauche sont cyclées elles aussi :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^a_\tau = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_\tau \mathbf{H}_\tau)\boldsymbol{\varepsilon}^b_\tau + \mathbf{K}_\tau \boldsymbol{\varepsilon}^o_\tau \tag{1.12a}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}^b_{\tau+1} = \mathbf{M}_{\tau+1}\boldsymbol{\varepsilon}^a_\tau + \boldsymbol{\varepsilon}^m_{\tau+1} \tag{1.12b}$$

Comme les erreurs d'ébauche, modèle et d'observation sont décorrélées si elles sont de nature différente ou si elles ont lieu à des instants différents, et que les erreurs d'analyse et d'ébauche intermédiaire sont propagées par des relations linéaires (équations 1.12a et 1.12b), on en conclut que :

— l'erreur d'ébauche intermédiaire $\boldsymbol{\varepsilon}^b_\tau$ et l'erreur d'observation $\boldsymbol{\varepsilon}^o_\tau$ sont décorrélées,

— l'erreur d'analyse $\boldsymbol{\varepsilon}^a_\tau$ et l'erreur de modèle $\boldsymbol{\varepsilon}^m_{\tau+1}$ sont décorrélées.

Ainsi, en reprenant l'équation 1.9 pour l'erreur d'analyse et en utilisant l'équation 1.12b pour l'erreur de prévision, on obtient le cycle des covariances d'erreur :

$$\mathbf{A}_\tau = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_\tau \mathbf{H}_\tau)\mathbf{B}_\tau \tag{1.13a}$$

$$\mathbf{B}_{\tau+1} = \mathbf{M}_{\tau+1}\mathbf{A}_\tau \mathbf{M}^{\mathrm{T}}_{\tau+1} + \mathbf{Q}_{\tau+1} \tag{1.13b}$$

Les équations 1.11a, 1.11b, 1.13a et 1.13b constituent un système permettant de propager de cycle en cycle l'analyse et la prévision, ainsi que leurs matrices de covariance d'erreur respectives. Il est appelé "filtre de Kalman" et fait suite aux travaux de Kalman (1960), bien que l'idée soit apparue dès 1958 dans un rapport technique de Swerling.

De façon générale, on peut montrer que l'opérateur $(\mathbf{I} - \mathbf{K}_\tau \mathbf{H}_\tau)$ possède des valeurs propres comprises entre 0 et 1. Son application aux covariances d'erreur d'ébauche dans l'étape d'analyse (équation 1.13a) a donc pour effet de réduire l'amplitude des variances d'erreur. À l'inverse, l'étape de propagation des covariances d'erreur de prévision (équation 1.13b) présente une croissance de ces mêmes variances d'erreur par deux mécanismes. D'un côté, l'application des modèles de prévision linéaire tangent et adjoint déforme la structure des covariances d'erreur d'analyse, ce qui peut engendrer une croissance moyenne des erreurs. En effet, pour des modèles de prévision chaotiques, certaines valeurs propres de $\mathbf{M}_{\tau+1}$ sont positives (valeurs propres associées aux vecteurs propres correspondant aux directions instables) et d'autres négatives (directions stables). D'autre part, l'erreur de modèle $\mathbf{Q}_{\tau+1}$ apporte une contribution systématiquement positive aux variances d'erreur. Au premier ordre, la stabilité du cycle d'assimilation/prévision est donc dépendante de l'apport d'information par les observations qui permet de réduire l'erreur lors de la phase d'analyse. Cet apport doit compenser la croissance de l'erreur lors de la phase de prévision.

1.1.4. Filtre de Kalman étendu

Dans le cas où l'opérateur d'observation et le modèle de prévision ne sont pas linéaires, les équations 1.11a et 1.11b de propagation de l'analyse et de l'ébauche sont transformées en :

$$\mathbf{x}^a_\tau = \mathbf{x}^b_\tau + \mathbf{K}_\tau \Big(\mathbf{y}^o_\tau - H_\tau(\mathbf{x}^b_\tau)\Big) \tag{1.14a}$$

$$\mathbf{x}^b_{\tau+1} = M_{\tau+1}(\mathbf{x}^a_\tau) \tag{1.14b}$$

tandis que les équations 1.13a et 1.13b de propagation des covariances restent formellement identiques, $\mathbf{H}_\tau$ et $\mathbf{M}_\tau$ étant désormais les tangents linéaires respectifs de H_τ et M_τ.

Ce système d'équations est appelé "filtre de Kalman étendu" (Gelb, 1974). D'après Julier

et Uhlmann (2004), ce filtre reste difficile à mettre en place en pratique, et ne supporte que de faibles non-linéarités à l'échelle de temps des cycles d'assimilation.

1.2. Approche variationnelle

Les méthodes variationnelles, utilisées en météorologie depuis les travaux de Le Dimet et Talagrand (1986) et Talagrand et Courtier (1987), assimilent non plus séquentiellement, mais simultanément toutes les observations disponibles pendant la fenêtre d'assimilation.

1.2.1. Méthode du maximum de vraisemblance

Pour alléger les notations, tous les vecteurs d'état $\mathbf{x}_0, \cdots, \mathbf{x}_\mathcal{T}$ aux instants $t_0, \cdots, t_\mathcal{T}$ de la fenêtre d'assimilation sont rassemblés dans un même vecteur de trajectoire $\underline{\mathbf{x}}$. De même, toutes les observations $\mathbf{y}^o_0, \cdots, \mathbf{y}^o_\mathcal{T}$ sont rassemblées dans un vecteur $\underline{\mathbf{y}}^o$:

$$\underline{\mathbf{x}}^{\mathrm{T}} = (\mathbf{x}_0^{\mathrm{T}} \cdots \mathbf{x}_\mathcal{T}^{\mathrm{T}}) \tag{1.15a}$$

$$\underline{\mathbf{y}}^{o\mathrm{T}} = (\mathbf{y}_0^{o\mathrm{T}} \cdots \mathbf{x}_\mathcal{T}^{o\mathrm{T}}) \tag{1.15b}$$

On cherche à déterminer la probabilité de la trajectoire $\underline{\mathbf{x}}$ quand les observations $\underline{\mathbf{y}}^o$ ont été prises en compte, soit $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}}|\underline{\mathbf{y}}^o)$. La loi de Bayes permet d'exprimer cette probabilité comme :

$$\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}}|\underline{\mathbf{y}}^o) = \frac{\mathbb{P}(\underline{\mathbf{y}}^o|\underline{\mathbf{x}})}{\mathbb{P}(\underline{\mathbf{y}}^o)}\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}}) \tag{1.16}$$

La probabilité *a priori* $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}})$ de la trajectoire $\underline{\mathbf{x}}$ est donc mise à jour pour obtenir la probabilité *a posteriori* $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}}|\underline{\mathbf{y}}^o)$ en utilisant l'information des observations $\underline{\mathbf{y}}^o$. Cette formulation du problème suppose implicitement que la distribution des observations et la distribution *a priori* sont indépendantes, donc que les erreurs d'ébauche et d'observation sont indépendantes.

On définit la fonction coût $J(\underline{\mathbf{x}})$ comme l'opposé du logarithme de $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}}|\underline{\mathbf{y}}^o)$:

$$J(\underline{\mathbf{x}}) = -\log\Big(\mathbb{P}(\underline{\mathbf{y}}^o|\underline{\mathbf{x}})\Big) - \log\Big(\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}})\Big) + \log\Big(\mathbb{P}(\underline{\mathbf{y}}^o)\Big) \tag{1.17}$$

La trajectoire d'analyse $\underline{\mathbf{x}}^a$ la plus vraisemblable est celle qui maximise la probabilité $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}}|\underline{\mathbf{y}}^o)$, ou qui minimise de façon équivalente la fonction coût $J(\underline{\mathbf{x}})$.

1.2.2. 4D-Var / 3D-Var

Pour rendre la fonction coût 1.17 calculable, on fait les hypothèses suivantes :

— La distribution $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{y}}^o|\underline{\mathbf{x}})$ est gaussienne et les erreurs d'observations sont sans biais :

$$\mathbb{P}(\underline{\mathbf{y}}^o|\underline{\mathbf{x}}) \propto \exp\left(\frac{1}{2}\Big(\underline{\mathbf{y}}^o - \underline{H}(\underline{\mathbf{x}})\Big)^{\mathrm{T}}\underline{\mathbf{R}}^{-1}\Big(\underline{\mathbf{y}}^o - \underline{H}(\underline{\mathbf{x}})\Big)\Big)\right) \tag{1.18}$$

où l'opérateur d'observation 4D $\underline{H}$ permet de passer de l'espace de la trajectoire vers celui des observations de toute la fenêtre d'assimilation. $\underline{\mathbf{R}}$ est la matrice de covariance 4D de toutes les erreurs d'observations. Dans l'hypothèse où celles-ci sont décorrélées quand elles ont lieu à des instants différents, $\underline{\mathbf{R}}$ devient diagonale par blocs (temporels)

et $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{y}}^o|\underline{\mathbf{x}})$ se factorise en :

$$\mathbb{P}(\underline{\mathbf{y}}^o|\underline{\mathbf{x}}) \propto \prod_{\tau=0}^{\mathcal{T}} \exp\left(\frac{1}{2}\Big(\mathbf{y}_\tau^o - H_\tau(\mathbf{x}_\tau)\Big)^{\mathrm{T}} \mathbf{R}_\tau^{-1}\Big(\mathbf{y}_\tau^o - H_\tau(\mathbf{x}_\tau)\Big)\right) \tag{1.19}$$

— L'erreur d'ébauche est décorrélée des erreurs de modèle, qui sont elles-mêmes décorrélées temporellement, ce qui permet la transformation de $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}})$ en une chaîne de Markov :

$$\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}}) = \mathbb{P}(\mathbf{x}_0)\mathbb{P}(\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_0)\cdots\mathbb{P}(\mathbf{x}_{\mathcal{T}}|\mathbf{x}_{\mathcal{T}-1}) \tag{1.20}$$

— Les distributions des éléments de la chaîne de Markov précédente sont gaussiennes, l'erreur d'ébauche et les erreurs de modèle sont sans biais, d'où :

$$\mathbb{P}(\mathbf{x}_0) \propto \exp\left(\frac{1}{2}(\mathbf{x}^b - \mathbf{x}_0)^{\mathrm{T}} \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^b - \mathbf{x}_0)\right) \tag{1.21a}$$

$$\mathbb{P}(\mathbf{x}_{\tau+1}|\mathbf{x}_\tau) \propto \exp\left(\frac{1}{2}\Big(\mathbf{x}_{\tau+1} - M_{\tau+1}(\mathbf{x}_\tau)\Big)^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}_{\tau+1}^{-1}\Big(\mathbf{x}_{\tau+1} - M_{\tau+1}(\mathbf{x}_\tau)\Big)\right) \tag{1.21b}$$

Ainsi, la fonction coût se simplifie en :

$$J(\underline{\mathbf{x}}) = J_b(\mathbf{x}_0) + J_o(\underline{\mathbf{x}}) + J_q(\underline{\mathbf{x}}) + \text{constante} \tag{1.22}$$

avec :

$$J_b(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}^b - \mathbf{x}_0)^{\mathrm{T}} \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}^b - \mathbf{x}_0) \tag{1.23a}$$

$$J_o(\underline{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2}\sum_{\tau=0}^{\mathcal{T}} \Big(\mathbf{y}_\tau^o - H_\tau(\mathbf{x}_\tau)\Big)^{\mathrm{T}} \mathbf{R}_\tau^{-1}\Big(\mathbf{y}_\tau^o - H_\tau(\mathbf{x}_\tau)\Big) \tag{1.23b}$$

$$J_q(\underline{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2}\sum_{\tau=0}^{\mathcal{T}-1} (\mathbf{x}_{\tau+1} - M_{\tau+1}(\mathbf{x}_\tau))^{\mathrm{T}} \mathbf{Q}_{\tau+1}^{-1}\Big(\mathbf{x}_{\tau+1} - M_{\tau+1}(\mathbf{x}_\tau)\Big) \tag{1.23c}$$

Cette formulation de la fonction coût est appelée "4D-Var à contrainte faible" (Courtier, 1997; Trémolet, 2006). Ses trois termes servent respectivement de rappel à l'ébauche, de rappel aux observations et de rappel au modèle.

Si on fait l'hypothèse que le modèle est parfait, tous les états de la trajectoire peuvent être calculés en intégrant le modèle depuis l'état initial $\mathbf{x}_0$, qui devient la variable de contrôle de la fonction coût. Le terme J_q disparait, tandis que le terme de rappel aux observations devient :

$$J_o(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}\sum_{\tau=0}^{\mathcal{T}} \Big(\mathbf{y}_\tau^o - H_\tau \circ M_\tau \circ \cdots \circ M_0(\mathbf{x}_0)\Big)^{\mathrm{T}} \mathbf{R}_\tau^{-1}\Big(\mathbf{y}_\tau^o - H_\tau \circ M_\tau \circ \cdots \circ M_0(\mathbf{x}_0)\Big) \tag{1.24}$$

où $\circ$ désigne la composition des opérateurs, et où M_0 est défini par extension comme l'identité. On parle alors de "4D-Var à contrainte forte".

Si la fenêtre d'assimilation se réduit à un seul instant, le modèle n'est plus utilisé et on parle alors de formulation "3D-Var" :

$$J(\mathbf{x}_0) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b)^{\mathrm{T}} \mathbf{B}^{-1}(\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^b) + \frac{1}{2}\Big(\mathbf{y}_0^o - H_0(\mathbf{x}_0)\Big)^{\mathrm{T}} \mathbf{R}_0^{-1}\Big(\mathbf{y}_0^o - H_0(\mathbf{x}_0)\Big) \tag{1.25}$$

Dans le cas où le modèle et l'opérateur d'observation sont linéaires, l'annulation du gradient de la fonction coût permet de déterminer explicitement l'analyse. On montre que celle-ci a la même expression que le BLUE (équation 1.10), en utilisant la formule de Sherman-Morrison-Woodbury (Sherman et Morrison, 1949, 1950) :

$$\mathbf{B}\mathbf{H}_0^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{H}_0\mathbf{B}\mathbf{H}_0^{\mathrm{T}}+\mathbf{R}_0\right)^{-1}=\left(\mathbf{B}^{-1}+\mathbf{H}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_0^{-1}\mathbf{H}_0\right)^{-1}\mathbf{H}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_0^{-1} \tag{1.26}$$

1.2.3. Méthode incrémentale

De nombreuses méthodes existent pour minimiser de façon itérative la fonction coût, d'autant que son gradient peut être aisément calculé : méthodes du gradient, du gradient conjugué, algorithme de Lanczos, méthode de quasi-Newton, etc. Deux problèmes se posent cependant. D'une part, cette minimisation est souvent très mal conditionnée en raison du terme de rappel à l'ébauche. D'autre part, la présence possible de minima locaux résultant de la non-linéarité des opérateurs H_{τ} et M_{τ} représente un danger important, la minimisation risquant alors de converger vers un état qui n'est pas la solution globale, l'analyse obtenue n'étant alors pas optimale.

L'approche incrémentale (Courtier *et al.*, 1994) consiste à minimiser des approximations quadratiques successives de la fonction coût totale. Elle se base sur une séparation de la variable de contrôle $\underline{\mathbf{x}}$ en une référence $\underline{\mathbf{x}}^g$ et un incrément $\delta\underline{\mathbf{x}}$:

$$\underline{\mathbf{x}}=\underline{\mathbf{x}}^g+\delta\underline{\mathbf{x}} \tag{1.27}$$

Les opérateurs non linéaires H_{τ} et M_{τ} sont linéarisés autour de $\underline{\mathbf{x}}^g$ pour rendre la fonction coût quadratique en $\delta\underline{\mathbf{x}}$.

Dans le cas du 3D-Var (équation 1.25), on définit respectivement l'incrément, l'incrément de l'ébauche et l'innovation par :

$$\delta\mathbf{x}_0=\mathbf{x}_0-\mathbf{x}_0^g \tag{1.28a}$$

$$\delta\mathbf{x}^b=\mathbf{x}^b-\mathbf{x}_0^g \tag{1.28b}$$

$$\mathbf{d}_0=\mathbf{y}_0^o-H_0(\mathbf{x}^b) \tag{1.28c}$$

La fonction coût 3D-Var incrémentale, quadratique en $\delta\mathbf{x}_0$, est alors donnée par :

$$J(\delta\mathbf{x}_0)=\frac{1}{2}\left(\delta\mathbf{x}_0-\delta\mathbf{x}^b\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}\left(\delta\mathbf{x}_0-\delta\mathbf{x}^b\right)+\frac{1}{2}\left(\mathbf{d}_0-\mathbf{H}_0\delta\mathbf{x}_0\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_0^{-1}\left(\mathbf{d}_0-\mathbf{H}_0\delta\mathbf{x}_0\right) \tag{1.29}$$

Lors de la première minimisation, l'ébauche sert de référence. Par la suite, l'analyse obtenue pour d'une approximation quadratique donnée, après un nombre d'itérations fixé ou après validation d'un critère de convergence, sert de référence pour l'approximation quadratique suivante. La résolution spatiale de la variable de contrôle peut aussi augmenter au cours des approximations successives, ce qui permet de mieux gérer les éventuelles non-linéarités du système. Pour le 4D-Var utilisé à Météo-France pour le modèle global ARPEGE, deux minimisations successives sont par exemple effectuées à des résolutions de T107 et T323, les incréments finaux étant par la suite interpolés sur la grille du modèle en T798.

La minimisation est rapide et sûre pour chaque approximation quadratique individuelle, mais il n'existe pas de preuve de convergence des analyses successives. Même dans le cas d'une convergence de ces analyses, rien ne garantit que la solution de l'approche incrémentale converge vers

la solution non quadratique. Cependant, cette méthode est tout de même efficace en pratique.

1.2.4. Préconditionnement de la minimisation

Dans le cadre d'une méthode incrémentale, il est possible d'accélérer la minimisation de la fonction coût grâce à un préconditionnement basé sur un changement de la variable de contrôle ("Control Variable Transform"). L'incrément $\delta\underline{\mathbf{x}}$ est remplacé par la variable $\underline{\boldsymbol{\chi}}$, avec :

$$\delta\underline{\mathbf{x}} = \underline{\mathbf{U}}\ \underline{\boldsymbol{\chi}} \tag{1.30}$$

Par exemple, en partant du 3D-Var incrémental (équation 1.29), et en posant $\delta\mathbf{x}_0 = \mathbf{U}_0\boldsymbol{\chi}_0$ la fonction coût devient :

$$\begin{aligned} J(\boldsymbol{\chi}_0) = &\frac{1}{2}(\boldsymbol{\chi}_0 - \boldsymbol{\chi}_0^b)^{\mathrm{T}}\mathbf{U}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{U}_0(\boldsymbol{\chi}_0 - \boldsymbol{\chi}_0^b) \\ &+ \frac{1}{2}(\mathbf{d}_0 - \mathbf{H}_0\mathbf{U}_0\boldsymbol{\chi}_0)^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_0^{-1}(\mathbf{d}_0 - \mathbf{H}_0\mathbf{U}_0\boldsymbol{\chi}_0) \end{aligned} \tag{1.31}$$

Le gradient de cette fonction coût est donné par :

$$\nabla J(\boldsymbol{\chi}_0) = \mathbf{U}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{U}_0(\boldsymbol{\chi}_0 - \boldsymbol{\chi}_0^b) - \mathbf{U}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_0^{-1}(\mathbf{d}_0 - \mathbf{H}_0\mathbf{U}_0\boldsymbol{\chi}_0) \tag{1.32}$$

et sa hessienne par :

$$\nabla\nabla^{\mathrm{T}}J(\boldsymbol{\chi}_0) = \mathbf{U}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{U}_0 + \mathbf{U}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{H}_0^{\mathrm{T}}\mathbf{R}_0^{-1}\mathbf{H}_0\mathbf{U}_0 \tag{1.33}$$

$$= \mathbf{U}_0^{\mathrm{T}}(\nabla\nabla^{\mathrm{T}}J(\delta\mathbf{x}_0))\mathbf{U}_0 \tag{1.34}$$

Les hessiennes des fonctions coût 1.29 et 1.31 sont donc reliés directement par la matrice $\mathbf{U}_0$.

L'objectif du préconditionnement est de construire $\mathbf{U}_0$ tel que $\nabla\nabla^{\mathrm{T}}J(\boldsymbol{\chi}_0) \simeq \mathbf{I}$, soit :

$$\mathbf{U}_0\mathbf{U}_0^{\mathrm{T}} \simeq \left(\nabla\nabla^{\mathrm{T}}J(\delta\mathbf{x}_0)\right)^{-1} \tag{1.35}$$

En pratique, on se contente souvent de définir $\mathbf{U}_0$ comme le modèle de racine carrée de la covariance d'erreur d'ébauche, $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}$ (cf. Bannister (2008b), schéma utilisé à Météo-France). Ceci assure un préconditionnement sous-optimal, car seul le terme J^b de la fonction coût est bien préconditionné, mais simple à mettre en œuvre. En notant que $\mathbf{R}_0$ est inconnue, et donc remplacée par un modèle $\overline{\mathbf{R}}_0$, la fonction coût minimisée dans la plupart des algorithmes variationnels est donc de la forme :

$$J(\boldsymbol{\chi}_0) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\chi}_0 - \boldsymbol{\chi}_0^b)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\chi}_0 - \boldsymbol{\chi}_0^b) + \frac{1}{2}(\mathbf{d}_0 - \mathbf{H}_0\overline{\mathbf{B}}^{1/2}\boldsymbol{\chi}_0)^{\mathrm{T}}\overline{\mathbf{R}}_0^{-1}(\mathbf{d}_0 - \mathbf{H}_0\overline{\mathbf{B}}^{1/2}\boldsymbol{\chi}_0) \tag{1.36}$$

$\mathbf{U}_0$ peut également être définie comme une combinaison linéaire de I termes :

$$\mathbf{U}_0 = \sum_{i=1}^{I}\mathbf{F}_i^{1/2}\overline{\mathbf{B}}_i^{1/2} \tag{1.37}$$

où chaque $\overline{\mathbf{B}}_i$ représente les statistiques d'erreur d'ébauche modélisées pour un phénomène météorologique donné, et où chaque $\mathbf{F}_i$ définit le sous-domaine où la matrice $\overline{\mathbf{B}}_i$ est appliquée. Cette approche est le principe de base du 3D-Var hétérogène, tel que développé par Montmerle

et Berre (2010).

Un préconditionnement de second niveau consiste à construire $\mathbf{U}_0\mathbf{U}_0^{\mathrm{T}}$ pour approcher $\left(\nabla\nabla^{\mathrm{T}}J(\delta\mathbf{x}_0)\right)^{-1}$ en utilisant une estimation de ses valeurs propres (Fisher et Courtier, 1995).

1.3. Covariances d'erreur d'ébauche

1.3.1. Impact sur l'incrément d'analyse

Cas général

Dans le cadre du BLUE (équation 1.10), l'incrément d'analyse est donnée par l'équation :

$$\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b = \mathbf{K}\mathbf{d} \tag{1.38}$$

L'information apportée au système, résumée par l'innovation $\mathbf{d} = \mathbf{y}^o - \mathbf{H}\mathbf{x}^b$, est donc diffusée à tous les éléments du vecteur d'état par le gain $\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R}\right)^{-1}$ (équation 1.8).

On note aussi que $\mathbf{K}\mathbf{d} = \mathbf{B}\mathbf{z}$ où $\mathbf{z}$ est un vecteur de taille n. Ainsi, l'incrément d'analyse est constitué d'une combinaison linéaire des colonnes de la matrice $\mathbf{B}$. La structure de cette matrice est donc déterminante pour comprendre la façon dont les observations vont permettre de corriger l'ébauche.

Cas à deux variables

Dans un cas simplifié à deux variables (x_1 et x_2), dont une seule est observée (x_1 observée par y_1^o), l'incrément d'analyse vaut :

$$x_1^a - x_1^b = B_{11}\frac{y_1^o - x_1^b}{B_{11} + R_{11}} \tag{1.39a}$$

$$x_2^a - x_2^b = B_{21}\frac{y_1^o - x_1^b}{B_{11} + R_{11}} \tag{1.39b}$$

Dans ces deux équations, l'innovation $y_1^o - x_1^b$ normalisée par son incertitude totale $B_{11} + R_{11}$ diffuse son information à l'incrément d'analyse :

— de la variable observée x_1 par la variance B_{11},
— de la variable non observée x_2 par la covariance B_{21}.

La figure 1.1 montre l'impact de la matrice de covariance d'ébauche dans le BLUE (a) et dans l'approche variationnelle (b). Comme prévu, la variable observée x_1 est mise à jour par les observations, ce qui réduit son incertitude. La variable non observée x_2 est aussi mise à jour par la covariance B_{21} si celle-ci n'est pas nulle (négative ici).

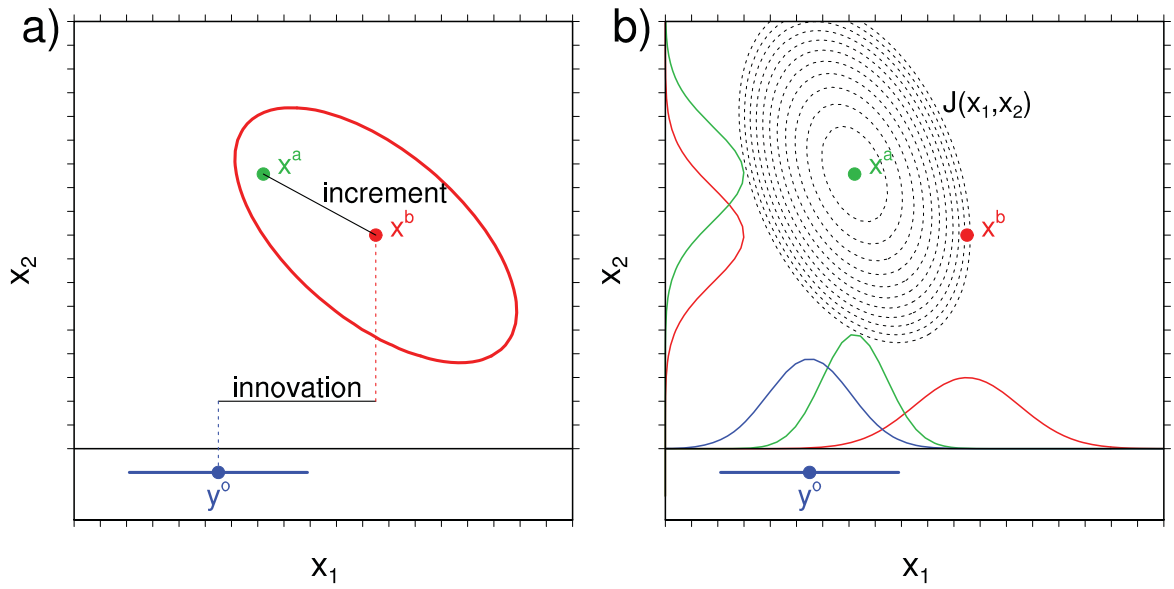


Figure 1.1. – Ébauche (rouge), observation (bleu) et analyse (vert), ainsi que leurs incertitudes. Dans le cas du BLUE (a), on a indiqué l'innovation et l'incrément d'analyse. Dans le cas du 3D-Var, on a ajouté les densités de probabilités marginales, ainsi que certains iso-contours de la fonction coût quadratique en pointillés.

1.3.2. Caractéristiques générales de la matrice B

Les modèles de prévision météorologique prenant en compte de nombreuses variables (vent, température, pression, humidité, hydrométéores, etc.), la matrice $\mathbf{B}$ est nécessairement multivariée, au sens où elle doit représenter les autocovariances d'erreurs d'ébauche de chacune de ces variables, mais aussi les covariances croisées entre variables. Comme l'analyse sert à initialiser une prévision, il est très important que celle-ci soit proche de l'attracteur du modèle de prévision, c'est-à-dire qu'elle en respecte les grands équilibres (ex. : géostrophisme et hydrostatisme en météorologie synoptique). Cela évite que la prévision ne démarre par un retour brutal de l'état du modèle vers cet attracteur, ce qui peut générer des ondes indésirables pendant un laps de temps appelé "spin-up", qui correspond au temps nécessaire aux champs du modèle pour s'équilibrer. Pour limiter ce phénomène, une solution consiste à s'assurer que les colonnes de $\mathbf{B}$ respectent ces relations d'équilibre.

Dans les équations du filtre de Kalman, le cycle de la matrice $\mathbf{B}$ est donné par les équations 1.13a et 1.13b, que l'on peut fusionner en :

$$\mathbf{B}_{\tau+1} = \mathbf{M}_{\tau+1}\Big(\mathbf{B}_\tau - \Big(\mathbf{B}_\tau\mathbf{H}_\tau^{\mathrm{T}}\big(\mathbf{H}_\tau\mathbf{B}_\tau\mathbf{H}_\tau^{\mathrm{T}} + \mathbf{R}_\tau\big)^{-1}\mathbf{H}_\tau\mathbf{B}_\tau\Big)\mathbf{M}_{\tau+1}^{\mathrm{T}} + \mathbf{Q}_{\tau+1} \tag{1.40}$$

Comme l'ont détaillé plusieurs études (Bouttier, 1994; Belo Pereira et Berre, 2006), la matrice $\mathbf{B}_{\tau+1}$ est ainsi influencée par :

- la structure et la nature du réseau d'observation (par $\mathbf{H}_\tau$),
- la structure des erreurs d'observation (par $\mathbf{R}_\tau$),
- le modèle de prévision (par $\mathbf{M}_{\tau+1}$),
- sa propre valeur au cycle précédent (par $\mathbf{B}_\tau$),
- la structure des erreurs de modèle (par $\mathbf{Q}_{\tau+1}$).

Dans le cas des systèmes de prévision météorologique, la matrice $\mathbf{B}_{\tau+1}$ a donc idéalement une structure spatiale :

— hétérogène : qui varie en fonction de la position spatiale,
— anisotrope : qui varie selon la direction concernée,
— dépendante à l'écoulement : qui varie selon le régime de temps,
— non séparable verticalement : qui n'est pas factorisable en un produit de structures horizontales et verticales (Bartello et Mitchell, 1992; Ingleby, 2001).

Une revue détaillée des propriétés de la matrice $\mathbf{B}$ peut être trouvée dans Bannister (2008a).

1.3.3. Modélisation de la matrice B

Principe

Avec des systèmes de grande taille, il est impossible d'estimer et de stocker tous les coefficients de la matrice $\mathbf{B}$. La solution est donc de construire un modèle $\overline{\mathbf{B}}$. Pour s'assurer que $\overline{\mathbf{B}}$ soit définie positive, le plus simple consiste à construire une racine carrée $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}$ de taille $n \times m$ telle que $\overline{\mathbf{B}} = \overline{\mathbf{B}}^{1/2}\overline{\mathbf{B}}^{\mathrm{T}/2}$. Cette racine carrée n'est pas unique, puisque pour toute matrice orthogonale $\mathbf{U}$ telle que $\mathbf{U}\mathbf{U}^{\mathrm{T}} = \mathbf{I}$, $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}\mathbf{U}$ est aussi une racine carrée de $\overline{\mathbf{B}}$. En général, $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}$ est constituée d'une succession d'opérateurs, peu coûteux à appliquer à un vecteur d'état, dont les transposées et les inverses sont également connus.

Modélisation de Derber et Bouttier (1999)

Si l'erreur d'ébauche $\boldsymbol{\varepsilon}^b$ a pour matrice de covariance $\mathbf{B}$, alors $\mathbf{B}^{-1/2}\boldsymbol{\varepsilon}^b$ a pour covariance la matrice identité. L'objectif de la modélisation de $\overline{\mathbf{B}}$ est donc de construire $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}$ de telle sorte que les m éléments de $\boldsymbol{\chi} = \overline{\mathbf{B}}^{-1/2}\boldsymbol{\varepsilon}^b$ soient décorrélés au mieux et de variance la plus proche de 1.

L'idée principale du modèle de Derber et Bouttier (1999) consiste à séparer $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}$ sous la forme :

$$\overline{\mathbf{B}}^{1/2} = \overline{\mathbf{K}}_p \overline{\mathbf{B}}_s^{1/2} \tag{1.41}$$

où $\overline{\mathbf{K}}_p$ est une matrice appelée "opérateur de balance", et $\overline{\mathbf{B}}_s$ une matrice de covariance appelée "transformation spatiale".

Les effets de $\overline{\mathbf{K}}_p$ et $\overline{\mathbf{B}}_s^{1/2}$ sont mieux compris en étudiant l'application de leurs inverses à l'erreur d'ébauche. Ainsi, on suppose que l'erreur d'ébauche $\boldsymbol{\varepsilon}^b$ comporte les n' variables du modèle notées $\boldsymbol{\varepsilon}_i^b$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{b\mathrm{T}} = \left(\boldsymbol{\varepsilon}_1^{b\mathrm{T}} \cdots \boldsymbol{\varepsilon}_{n'}^{b\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} \tag{1.42}$$

La première étape consiste à décorréler ces variables en appliquant $\overline{\mathbf{K}}_p^{-1}$:

$$\widetilde{\boldsymbol{\chi}} = \overline{\mathbf{K}}_p^{-1}\boldsymbol{\varepsilon}^b \tag{1.43}$$

où $\widetilde{\boldsymbol{\chi}}$ est un vecteur comportant m' variables $\widetilde{\boldsymbol{\chi}}_i$:

$$\widetilde{\boldsymbol{\chi}}^{\mathrm{T}} = \left(\widetilde{\boldsymbol{\chi}}_1^{\mathrm{T}} \cdots \widetilde{\boldsymbol{\chi}}_{m'}^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}} \tag{1.44}$$

$\overline{\mathbf{K}}_p$ est constitué en toute généralité de $n' \times m'$ blocs $\overline{\mathbf{K}}_{p,ij}$. Dans la plupart des cas cependant, on choisit l'ordre des variables de sorte que $\overline{\mathbf{K}}_p$ soit triangulaire par blocs, donc facilement

inversible. La transformation 1.43 rend les variables $\widetilde{\boldsymbol{\chi}}_i$ décorrélées deux à deux :

$$\mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{\chi}}_i \widetilde{\boldsymbol{\chi}}_j^{\mathrm{T}}] \simeq 0 \tag{1.45}$$

La matrice de covariance de $\widetilde{\boldsymbol{\chi}}$ est modélisée par $\overline{\mathbf{B}}_s$, diagonale par blocs et donc facilement inversible : chacun des m' blocs diagonaux de $\overline{\mathbf{B}}_{s,i}$ contient le modèle d'autocovariances de $\widetilde{\boldsymbol{\chi}}_i$. La seconde étape consiste alors à normaliser chaque sous-vecteur $\widetilde{\boldsymbol{\chi}}_i$ en appliquant $\overline{\mathbf{B}}_s^{-1/2}$:

$$\boldsymbol{\chi} = \overline{\mathbf{B}}_s^{-1/2} \widetilde{\boldsymbol{\chi}} \tag{1.46}$$

L'objectif de la modélisation de $\overline{\mathbf{K}}_p$ et $\overline{\mathbf{B}}_s$ est d'obtenir :

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\chi}\boldsymbol{\chi}^{\mathrm{T}}] \simeq \mathbf{I} \tag{1.47}$$

Chacun des $(n')^2$ blocs $\overline{\mathbf{B}}_{ij}$ de la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ correspondant à la covariance entre les erreurs $\boldsymbol{\varepsilon}_i^b$ et $\boldsymbol{\varepsilon}_j^b$ est donc modélisé au total par :

$$\overline{\mathbf{B}}_{ij} = \sum_{k=1}^{m'} \overline{\mathbf{K}}_{p,ik} \overline{\mathbf{B}}_{s,k} \overline{\mathbf{K}}_{p,jk}^{\mathrm{T}} \tag{1.48}$$

Selon la manière dont sont conçus et réglés l'opérateur d'observation et pour les autocovariances, le modèle $\overline{\mathbf{B}}$ peut représenter plus ou moins fidèlement les caractéristiques d'hétérogénéité, d'anisotropie, de dépendance à l'écoulement et de non-séparabilité verticale de $\mathbf{B}$.

1.4. Méthodes d'ensemble

1.4.1. Intérêt général

Les méthodes séquentielles et variationnelles permettent un cyclage efficace des analyses et des prévisions, mais celui des covariances d'erreur reste problématique.

Les filtres de Kalman donnent une méthode explicite pour propager les covariances. Cependant, le stockage des matrices de covariance complètes (de taille n^2) et le calcul des produits matriciels (de l'ordre de n^3 opérations) ne sont pas applicables pour des systèmes de grande dimension (Dee, 1995). Pour envisager une application météorologique, il faut que la résolution du modèle soit très basse (Bouttier, 1994), ce qui n'est pas envisageable en prévision numérique opérationnelle.

Le formalisme variationnel du 4D-Var permet de propager implicitement les covariances d'erreur d'ébauche au sein de la fenêtre d'assimilation, mais pas d'une fenêtre d'assimilation à la suivante. Les covariances d'erreur d'ébauche sont donc spécifiées à nouveau par l'utilisateur à chaque début de fenêtre. Or, la manière dont elles sont modélisées influe sur leur réalisme et limite leur dépendance à la situation météorologique.

L'idée générale des méthodes d'ensemble est d'estimer les covariances d'erreur d'ébauche à l'aide d'un ensemble de prévisions perturbées échantillonnant ces erreurs, par une méthode de Monte-Carlo.

Deux formes d'erreurs apparaissent lors de cette estimation :

— l'erreur systématique, due aux différences entre la dynamique des erreurs (par exemple : équations 1.12a et 1.12b pour le filtre de Kalman) et la dynamique des perturbations de l'ensemble.
— l'erreur aléatoire, appelée aussi "erreur de sous-échantillonnage", due à la taille finie de l'ensemble, qui est limitée pour des raisons de coût de calcul.

De plus, le calcul du gradient de la fonction coût, utilisé dans la majorité des algorithmes de minimisation, nécessite l'intégration du tangent linéaire du modèle de prévision et de son adjoint (Talagrand et Courtier, 1987). Or, ces intégrations sont très coûteuses (environ deux fois plus que pour le modèle non linéaire), et doivent être effectuées à chaque itération de la minimisation. Certaines méthodes d'ensemble permettent de se passer du tangent linéaire et de l'adjoint du modèle de prévision, ce qui constitue un gain considérable en ce qui concerne le coût de calcul, la scalabilité (prévisions de l'ensemble conduites en parallèle), et la maintenance des codes (difficile pour le tangent linéaire et l'adjoint).

Enfin, les méthodes d'ensemble permettent de fournir des conditions initiales perturbées cohérentes pour initialiser des systèmes de prévision d'ensemble.

1.4.2. Typologie des méthodes d'ensemble

Il existe de très nombreux schémas basés sur cette idée, dont il serait difficile de dresser une liste exhaustive. Cependant, il est possible d'en résumer les différents types, en se basant sur trois critères :

1. Selon les schémas, l'ensemble peut être construit seul ou accompagné d'un cycle d'assimilation déterministe (i.e. sans perturbations aléatoires), qui utilise en partie ou en totalité les covariances de l'ensemble lors de la phase d'assimilation. Ce cycle d'assimilation déterministe peut également servir en retour à ajuster la valeur moyenne de l'ensemble. L'ensemble peut être propagé par le même modèle de prévision que le cycle d'assimilation déterministe, ou par un modèle différent, ou encore à résolution spatiale plus lâche.

2. L'objectif principal d'un ensemble est de fournir des covariances d'erreur d'ébauche, mais la manière d'utiliser les données de l'ensemble à cette fin peut varier. Dans un premier cas, l'ensemble peut servir à calibrer les paramètres d'un modèle de covariance préétabli. Dans un second cas, ces covariances sont calculées directement à partir de l'ensemble, avec possibilité d'une étape de filtrage pour éliminer le bruit d'échantillonnage. Les covariances peuvent être calculées en début de fenêtre d'assimilation (3D) ou tout au long de celle-ci (4D). Elles peuvent également être combinées avec des covariances climatologiques dans un schéma hybride (Hamill et Snyder, 2000; Wang *et al.*, 2007, 2008a,b).

3. Il est nécessaire de mettre à jour les membres de l'ensemble à chaque cycle d'assimilation. Pour cela, on peut leur faire assimiler les observations, telles quelles ou perturbées (Houtekamer et Mitchell, 1998; Whitaker et Hamill, 2002; Tippett *et al.*, 2003; Sakov et Oke, 2008). Comme dans le cas déterministe, l'assimilation des observations peut être séquentielle ou variationnelle, locale ou globale. On peut aussi ré-échantillonner la distribution des perturbations à partir d'informations obtenues pendant la minimisation du cycle d'assimilation déterministe (Zupanski, 2005; Auligné, 2012), qui est alors le seul à assimiler les observations.

1.4.3. Exemples d'algorithmes

On se propose de détailler ici à titre d'exemple deux méthodes permettant de générer un ensemble (filtre de Kalman d'ensemble et assimilation d'ensemble) ainsi qu'une méthode variationnelle permettant d'utiliser les données d'un ensemble (4D-EnVar).

Filtre de Kalman d'ensemble

Le filtre de Kalman d'ensemble (EnKF) est une méthode séquentielle proposée par Evensen (1994). Il utilise un ensemble de N prévisions perturbées $\{\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau}\}_{1\leq p\leq N}$, l'indice p marquant le numéro du membre et l'indice τ l'instant t_τ, pour estimer les covariances d'erreur d'ébauche entre l'espace modèle et l'espace des observations, ainsi qu'au sein de l'espace des observations :

$$\widetilde{\mathbf{B}}_\tau \mathbf{H}_\tau^{\mathrm{T}} = \frac{1}{N-1}\sum_{p=1}^{N}\Big(\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau} - \langle\widetilde{\mathbf{x}}^b\rangle\Big)\Big(\mathbf{H}_\tau\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau} - \langle\mathbf{H}_\tau\widetilde{\mathbf{x}}^b_\tau\rangle\Big)^{\mathrm{T}} \tag{1.49a}$$

$$\mathbf{H}_\tau\widetilde{\mathbf{B}}_\tau\mathbf{H}_\tau^{\mathrm{T}} = \frac{1}{N-1}\sum_{p=1}^{N}\Big(\mathbf{H}_\tau\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau} - \langle\mathbf{H}_\tau\widetilde{\mathbf{x}}^b_\tau\rangle\Big)\Big(\mathbf{H}_\tau\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau} - \langle\mathbf{H}_\tau\widetilde{\mathbf{x}}^b_\tau\rangle\Big)^{\mathrm{T}} \tag{1.49b}$$

où les chevrons désignent la moyenne d'ensemble. Le gain du BLUE (équation 1.8) est alors approché par :

$$\widetilde{\mathbf{K}}_\tau = \widetilde{\mathbf{B}}_\tau\mathbf{H}_\tau^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}_\tau\widetilde{\mathbf{B}}_\tau\mathbf{H}_\tau^{\mathrm{T}} + \overline{\mathbf{R}}_\tau)^{-1} \tag{1.50}$$

où $\overline{\mathbf{R}}_\tau$ est une approximation de $\mathbf{R}_\tau$. Comme $\overline{\mathbf{R}}_\tau$ est généralement diagonale par blocs, les observations peuvent être assimilées par groupes successifs d'observations corrélées, ce qui facilite l'inversion matricielle dans l'équation 1.50 (Houtekamer et Mitchell, 2001; Hamill *et al.*, 2001). Depuis les travaux de Houtekamer et Mitchell (1998), il est apparu important de perturber les observations assimilées par chaque membre pour rendre la théorie cohérent, à l'aide d'une perturbation $\delta\widetilde{\mathbf{y}}^o_{p,\tau}$ de moyenne nulle et de covariance $\overline{\mathbf{R}}_\tau$: $\widetilde{\mathbf{y}}^o_{p,\tau} = \widetilde{\mathbf{y}}^o_\tau + \delta\widetilde{\mathbf{y}}^o_{p,\tau}$. L'analyse de chaque membre est donc effectuée en utilisant le gain $\widetilde{\mathbf{K}}_\tau$ et l'opérateur d'observation non linéaire H_τ :

$$\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau} = \widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau} + \widetilde{\mathbf{K}}_\tau\Big(\widetilde{\mathbf{y}}^o_{p,\tau} - H_\tau(\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau})\Big) \tag{1.51}$$

Chaque analyse sert alors à initialiser la prévision perturbée du cycle suivant, propagée par le modèle de prévision non linéaire :

$$\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau+1} = M_{\tau+1}(\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau}) \tag{1.52}$$

Ce schéma est très simple à implémenter, et la phase de prévision est naturellement parallélisable. Toutefois, la taille de l'ensemble est limitée en raison du coût de calcul du modèle de prévision, ce qui introduit un bruit d'échantillonnage important dans l'estimation des covariances. Ceci réduit le rang des matrices de covariance et l'analyse résultante est bruitée. Pour limiter ces effets, de nombreux auteurs (après Houtekamer et Mitchell (2001)) proposent de multiplier les covariances estimées par un coefficient de modération. La plupart du temps, ce coefficient dépend de la séparation à l'observation concernée, ce qui "localise" l'impact des observations.

Un autre problème de ce filtre provient de l'absence de prise en compte de l'erreur de mo-

dèle dans la phase de prévision. Au premier ordre, la perturbation de la prévision 1.52 vaut :

$$\delta\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau+1} \simeq \mathbf{M}_{\tau+1}\delta\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau} \tag{1.53}$$

En comparant à l'équation 1.12b, il manque une perturbation pour prendre en compte l'erreur de modèle. Les covariances d'erreur d'ébauche s'en trouvent sous-estimées, ce qui diminue par construction l'impact des observations pour corriger les prévisions lors de l'analyse. Progressivement, si l'ensemble continue de se contracter, ses membres n'assimilent plus les observations et divergent complètement de la vérité. Pour éviter cette divergence, plusieurs techniques d'inflation de l'ensemble ont été développées avec une efficacité variable (Houtekamer *et al.*, 2009; Whitaker et Hamill, 2012) : perturbations additives, inflation multiplicative, modèles différents pour les différents membres, perturbations stochastiques des paramétrisations physiques, rétrodiffusion stochastique de l'énergie cinétique, etc. Certaines variantes du filtre de Kalman d'ensemble permettent enfin de se passer d'inflation (Bocquet, 2011; Bocquet et Sakov, 2012).

Assimilation d'ensemble

L'objectif de l'assimilation d'ensemble est d'obtenir un ensemble de prévisions perturbées dont les covariances sont cohérentes avec celles du cycle d'assimilation déterministe (Berre *et al.*, 2006). Dans le cas d'un système où le gain modélisé $\overline{\mathbf{K}}_\tau$ est différent du gain optimal $\mathbf{K}_\tau$, la dynamique des erreurs du filtre de Kalman (équations 1.12a et 1.12b) engendre une dynamique des covariances d'erreur différente des équations 1.13a et 1.13b :

$$\mathbf{A}_\tau = (\mathbf{I} - \overline{\mathbf{K}}_\tau\mathbf{H}_\tau)\mathbf{B}_\tau(\mathbf{I} - \overline{\mathbf{K}}_\tau\mathbf{H}_\tau)^{\mathrm{T}} + \overline{\mathbf{K}}_\tau\mathbf{R}_\tau\overline{\mathbf{K}}_\tau^{\mathrm{T}} \tag{1.54a}$$

$$\mathbf{B}_{\tau+1} = \mathbf{M}_{\tau+1}\mathbf{A}_\tau\mathbf{M}_{\tau+1}^{\mathrm{T}} + \mathbf{Q}_{\tau+1} \tag{1.54b}$$

On peut tenter d'approcher cette dynamique par celle de perturbations d'analyse et d'ébauche $\delta\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau}$ et $\delta\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau}$. Les analyses perturbées sont données par :

$$\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau} = \widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau} + \overline{\mathbf{K}}_\tau\left(\widetilde{\mathbf{y}}^o_{p,\tau} - H_\tau(\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau})\right) \tag{1.55}$$

où $\widetilde{\mathbf{y}}^o_{p,\tau}$ est le vecteur des observations perturbées de la même façon que pour le filtre de Kalman d'ensemble. L'intégration du modèle est aussi perturbée par $\delta\widetilde{\mathbf{x}}^m_{p,\tau+1}$ de moyenne nulle et de covariance $\overline{\mathbf{Q}}_{\tau+1}$:

$$\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau+1} = M_{\tau+1}(\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau}) + \delta\widetilde{\mathbf{x}}^m_{1,\tau+1} \tag{1.56}$$

Ainsi, les perturbations d'analyse et d'ébauche suivent une dynamique proche de celles des erreurs dans les équations 1.12a et 1.12b :

$$\delta\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau} = (\mathbf{I} - \overline{\mathbf{K}}_\tau\mathbf{H}_\tau)\delta\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau} + \overline{\mathbf{K}}_\tau\delta\widetilde{\mathbf{y}}^o_{p,\tau} \tag{1.57a}$$

$$\delta\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau+1} \simeq \mathbf{M}_{\tau+1}\delta\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau} + \delta\widetilde{\mathbf{x}}^m_{p,\tau+1} \tag{1.57b}$$

On estime les covariances d'erreur à partir des N perturbations de l'ensemble grâce à un estimateur noté Cov_N :

$$\widetilde{\mathbf{A}}_\tau = \mathrm{Cov}_N\left(\delta\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau}, \delta\widetilde{\mathbf{x}}^a_{p,\tau}\right) \tag{1.58a}$$

$$\widetilde{\mathbf{B}}_\tau = \mathrm{Cov}_N\left(\delta\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau}, \delta\widetilde{\mathbf{x}}^b_{p,\tau}\right) \tag{1.58b}$$

En supposant que cet estimateur possède les propriétés de bilinéarité, ce qui est le cas habituellement, on obtient :

$$\begin{aligned}\widetilde{\mathbf{A}}_{\tau} &= (\mathbf{I}-\overline{\mathbf{K}}_{\tau}\mathbf{H}_{\tau})\widetilde{\mathbf{B}}_{\tau}(\mathbf{I}-\overline{\mathbf{K}}_{\tau}\mathbf{H}_{\tau})^{\mathrm{T}}+\overline{\mathbf{K}}_{\tau}\widetilde{\mathbf{R}}\overline{\mathbf{K}}_{\tau}^{\mathrm{T}}\\ &\quad+(\mathbf{I}-\overline{\mathbf{K}}_{\tau}\mathbf{H}_{\tau})\operatorname{Cov}_{N}(\delta\widetilde{\mathbf{x}}^{b}_{p,\tau},\delta\widetilde{\mathbf{y}}^{o}_{p,\tau})\overline{\mathbf{K}}_{\tau}^{\mathrm{T}}+\overline{\mathbf{K}}_{\tau}\operatorname{Cov}_{N}(\delta\widetilde{\mathbf{y}}^{o}_{p,\tau},\delta\widetilde{\mathbf{x}}^{b}_{p,\tau})(\mathbf{I}-\overline{\mathbf{K}}_{\tau}\mathbf{H}_{\tau})^{\mathrm{T}} \qquad (1.59a)\\ \widetilde{\mathbf{B}}_{\tau+1} &= \mathbf{M}_{\tau+1}\widetilde{\mathbf{A}}_{\tau}\mathbf{M}_{\tau+1}^{\mathrm{T}}+\widetilde{\mathbf{Q}}_{\tau+1}\\ &\quad+\mathbf{M}_{\tau+1}\operatorname{Cov}_{N}(\delta\widetilde{\mathbf{x}}^{a}_{p,\tau},\delta\widetilde{\mathbf{x}}^{m}_{p,\tau+1})+\operatorname{Cov}_{N}(\delta\widetilde{\mathbf{x}}^{m}_{p,\tau+1},\delta\widetilde{\mathbf{x}}^{a}_{p,\tau})\mathbf{M}_{\tau+1}^{\mathrm{T}} \qquad (1.59b)\end{aligned}$$

où $\widetilde{\mathbf{R}}_{\tau}=\operatorname{Cov}_{N}(\delta\widetilde{\mathbf{y}}^{o}_{p,\tau},\delta\widetilde{\mathbf{y}}^{o}_{p,\tau})$ et $\widetilde{\mathbf{Q}}_{\tau+1}=\operatorname{Cov}_{N}(\delta\widetilde{\mathbf{x}}^{m}_{p,\tau+1},\delta\widetilde{\mathbf{x}}^{m}_{p,\tau+1})$.
Dans la limite d'un ensemble de taille infinie, les covariances croisées comme $\operatorname{Cov}_{N}(\delta\widetilde{\mathbf{x}}^{b}_{p,\tau},\delta\widetilde{\mathbf{y}}^{o}_{p,\tau})$ s'annulent, tandis que les autocovariances estimées des perturbations explicites (i.e. $\widetilde{\mathbf{R}}_{\tau}$ et $\widetilde{\mathbf{Q}}_{\tau+1}$) convergent vers les covariances spécifiées (i.e. $\overline{\mathbf{R}}_{\tau}$ et $\overline{\mathbf{Q}}_{\tau+1}$). Ceci mène à :

$$\widetilde{\mathbf{A}}^{\star}_{\tau}=\lim_{N\to\infty}\widetilde{\mathbf{A}}_{\tau}=(\mathbf{I}-\overline{\mathbf{K}}_{\tau}\mathbf{H}_{\tau})\widetilde{\mathbf{B}}^{\star}_{\tau}(\mathbf{I}-\overline{\mathbf{K}}_{\tau}\mathbf{H}_{\tau})^{\mathrm{T}}+\overline{\mathbf{K}}_{\tau}\overline{\mathbf{R}}_{\tau}\overline{\mathbf{K}}_{\tau}^{\mathrm{T}} \qquad (1.60a)$$

$$\widetilde{\mathbf{B}}^{\star}_{\tau+1}=\lim_{N\to\infty}\widetilde{\mathbf{B}}_{\tau+1}=\mathbf{M}_{\tau+1}\widetilde{\mathbf{A}}^{\star}_{\tau}\mathbf{M}_{\tau+1}^{\mathrm{T}}+\overline{\mathbf{Q}}_{\tau+1} \qquad (1.60b)$$

Ainsi, dans l'hypothèse où les covariances des perturbations spécifiées (i.e. $\overline{\mathbf{R}}$ et $\overline{\mathbf{Q}}$) se rapprochent des covariances d'erreur (i.e. $\mathbf{R}$ et $\mathbf{Q}$), la dynamique des covariances asymptotiques suit celle des covariances d'erreurs. L'ensemble ainsi constitué permet d'estimer certains paramètres d'un modèle de covariance d'erreur d'ébauche $\overline{\mathbf{B}}$, servant dans le calcul du gain modélisé $\overline{\mathbf{K}}_{\tau}$. Celui-ci est utilisé pour l'assimilation des observations dans le cycle d'assimilation déterministe et pour les membres de l'ensemble, afin d'assurer la cohérence des covariances estimées.

4D-EnVar

Le 4D-EnVar est un schéma variationnel permettant d'utiliser les données d'un ensemble pour le terme de rappel à l'ébauche, sans présumer de la manière dont l'ensemble est généré. Parmi les études ayant conduit à la formalisation progressive du 4D-EnVar, on peut citer Lorenc (2003); Buehner (2005); Liu *et al.* (2008, 2009); Desroziers *et al.* (2014).

Comme dans le cas du 4D-Var à contrainte faible, la formulation 4D-EnVar suppose que les distributions de $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{y}}^{o}|\underline{\mathbf{x}})$ et $\mathbb{P}(\underline{\mathbf{x}})$ sont gaussiennes et que les erreurs sont sans biais, mais elle ne fait pas d'hypothèse supplémentaire. En particulier, les erreurs ayant lieu à différents instants peuvent être corrélées. La fonction coût 1.17 devient donc :

$$J(\underline{\mathbf{x}})=J_{b}(\underline{\mathbf{x}})+J_{o}(\underline{\mathbf{x}}) \qquad (1.61)$$

avec :

$$J_{b}(\underline{\mathbf{x}})=\frac{1}{2}(\underline{\mathbf{x}}-\underline{\mathbf{x}^{b}})^{\mathrm{T}}\underline{\widetilde{\mathbf{B}}}^{-1}(\underline{\mathbf{x}}-\underline{\mathbf{x}^{b}}) \qquad (1.62a)$$

$$J_{o}(\underline{\mathbf{x}})=\frac{1}{2}\Big(\underline{\mathbf{y}}^{o}-\underline{H}(\underline{\mathbf{x}})\Big)^{\mathrm{T}}\underline{\overline{\mathbf{R}}}^{-1}\Big(\underline{\mathbf{y}}^{o}-\underline{H}(\underline{\mathbf{x}})\Big) \qquad (1.62b)$$

où $\underline{\mathbf{x}^{b}}$ est la trajectoire issue de l'état $\mathbf{x}^{b}$ par intégration du modèle de prévision au sein de la fenêtre d'assimilation :

$$\underline{\mathbf{x}}^{b\mathrm{T}}=\Big(\mathbf{x}^{b\mathrm{T}}\Big(M_{1}(\mathbf{x}^{b})\Big)^{\mathrm{T}}\cdots\Big(M_{\mathcal{T}}\circ\cdots\circ M_{1}(\mathbf{x}^{b})\Big)^{\mathrm{T}}\Big) \qquad (1.63)$$

La matrice de covariance 4D $\underline{\underline{\widetilde{\mathbf{B}}}}$ est déduite des N trajectoires perturbées $\{\underline{\widetilde{\mathbf{x}}}_p^b\}_{1\leq p\leq N}$ de l'ensemble :

$$\underline{\underline{\widetilde{\mathbf{B}}}} = \frac{1}{N-1}\left(\underline{\widetilde{\mathbf{x}}}_p^b - \langle\underline{\widetilde{\mathbf{x}}}^b\rangle\right)\left(\underline{\widetilde{\mathbf{x}}}_p^b - \langle\underline{\widetilde{\mathbf{x}}}^b\rangle\right)^{\mathrm{T}} \tag{1.64}$$

Dans la pratique, le nombre limité de membres dans l'ensemble induit un bruit d'échantillonnage significatif dans $\underline{\underline{\widetilde{\mathbf{B}}}}$, qui doit être réduit au moyen d'un filtrage approprié. En pratique, les performances obtenues par un 4D-EnVar dont le terme $J_b(\underline{\mathbf{x}})$ est purement ensembliste ne sont pas satisfaisantes pour les tailles d'ensemble accessible. Il est souvent bénéfique d'ajouter un terme de rappel à l'ébauche climatologique, pour obtenir une fonction coût hybride (Clayton *et al.*, 2012).

Cas à deux variables

Dans la figure 1.2, on reprend la même situation que dans la figure 1.1 pour le filtre de Kalman d'ensemble et pour le 3D-EnVar, version du 4D-EnVar où les observations ne sont disponibles qu'à un seul instant.

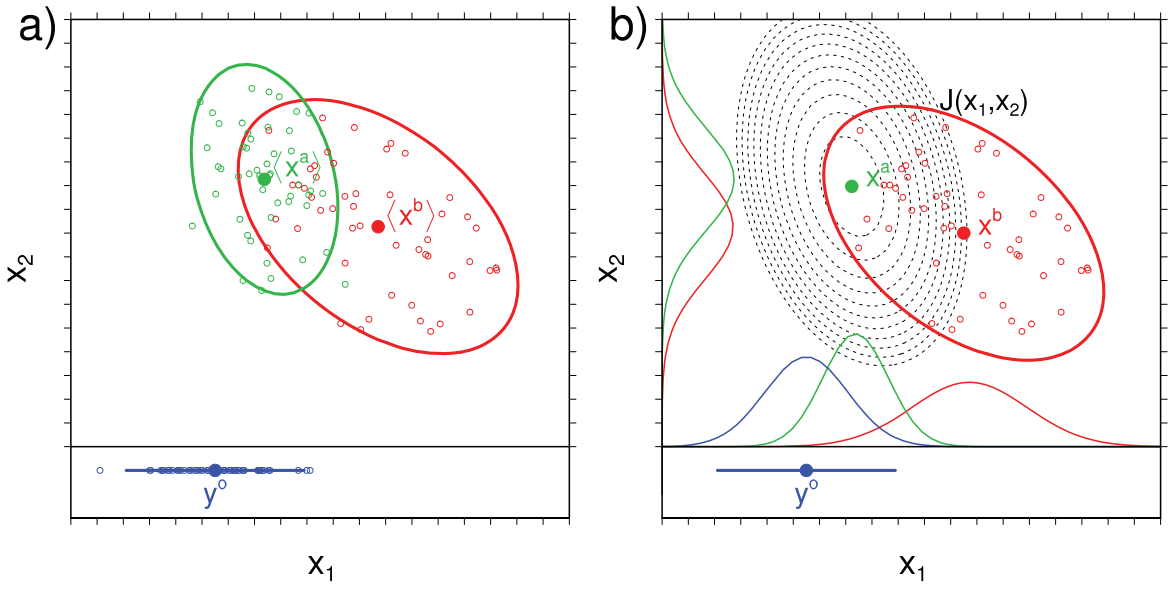


Figure 1.2. – Ébauche (rouge), observation (bleu) et analyse (vert), ainsi que les membres de l'ensemble (cercles) et leurs incertitudes. Dans le cas de l'EnKF (a) l'ébauche et l'analyse sont données par la moyenne d'ensemble, tandis que dans le cas du 3D-EnVar, il s'agit du cycle d'assimilation déterministe. Dans le cas de 3D-EnVar, on a ajouté les densités de probabilités marginales, ainsi que certains iso-contours de la fonction coût quadratique en pointillés.

Pour l'EnKF, les observations perturbées de la variable x_1 assimilées par chacun des membres sont indiquées en bas du graphe a). Le 3D-EnVar est très similaire au 3D-Var, à la différence que les covariances d'erreur d'ébauche sont estimées à partir de l'ensemble. Dans ce cas idéalisé à deux variables, la taille de l'ensemble (50 membres ici) est très grande par rapport à la taille du système, ce qui permet une estimation précise des covariances d'erreur d'ébauche. Cependant, la dimension des systèmes de prévision numérique du temps est très supérieure aux tailles d'ensemble accessibles de façon opérationnelle. Le bruit d'échantillonnage qui apparait nécessairement dans l'estimation des covariances doit donc être filtré avant toute utilisation de celles-ci dans le système d'assimilation pour assurer sa qualité.

2 | Diagnostic des covariances d'erreur d'ébauche à l'échelle convective

Après une description du modèle AROME, de son système d'assimilation et des observations assimilées, on détaille dans ce chapitre la mise en place d'une assimilation d'ensemble à partir de ce modèle. Les covariances d'erreur d'ébauche sont diagnostiquées dans ce contexte lors d'un événement de précipitations intenses, la grande taille de l'ensemble permettant de s'intéresser aux effets du sous-échantillonnage.

Sommaire

2.1	**Assimilation d'ensemble avec le modèle AROME**	**35**
2.1.1	Description du modèle AROME	35
2.1.2	Systèmes d'assimilation	38
2.1.3	Assimilations d'ensemble	41
2.1.4	Mise en place des grands ensembles	41
2.2	**Spécificités de l'erreur d'ébauche à échelle convective**	**44**
2.2.1	Contexte expérimental	44
2.2.2	Diagnostic expérimental des variances d'erreur d'ébauche	44
2.2.3	Diagnostic expérimental des tenseurs LCH	50

2.1. Assimilation d'ensemble avec le modèle AROME

2.1.1. Description du modèle AROME

Le modèle de prévision numérique du temps AROME (Application de la Recherche à l'Opérationnel à Méso-Echelle, Seity *et al.* (2011)) est opérationnel à Météo-France depuis décembre 2008. Ce modèle s'est construit à partir de paramétrisations physiques extraites du modèle de recherche Méso-NH (Lafore *et al.*, 1998) et du cœur dynamique du modèle d'échelle régionale ALADIN (Aire Limitée, Adaptation Dynamique et développement International, ALADIN International Team, 1997). Actuellement, AROME possède une résolution de 2,5 km, sur un domaine total de 1875 km par 1800 km centré sur la France (cf. figure 2.1). Une résolution de 1,3 km est visée à l'horizon 2015.

En réalité, ce domaine comprend trois zones :
- la zone d'intégration (zone C), rectangle le plus interne de la figure 2.1,
- la zone de couplage (zone I), couronne entourant la zone C, où a lieu une relaxation de type Davies (1976) vers les champs du modèle coupleur ARPEGE,
- la zone d'extension (zone E), bande non physique au nord et à l'est du domaine permettant de rendre les champs du modèle bipériodiques, suivant la méthode de Haugen et Machenhauer (1993) et Radnoti (1995).

Ce découpage permet d'intégrer les équations non hydrostatiques par un schéma semi-implicite semi-Lagrangien en calculant les gradients dans l'espace spectral (bi-Fourier à troncature elliptique). Les principales variables pronostiques (u, v, T, p_s) sont ainsi traitées dans l'espace

spectral, tandis que l'humidité spécifique q est représentée dans l'espace physique, de même que les précipitations liquides et solides, décrites explicitement par 5 types d'hydrométéores : l'eau nuageuse q_l, la pluie q_r, la glace nuageuse q_i, la neige q_s et la neige roulée (graupel) q_g.

La discrétisation verticale en 60 niveaux se base sur une coordonnée hybride qui suit le relief et se relaxe progressivement vers des niveaux isobares (Sangster, 1960) jusqu'à une altitude de 1 hPa, comme le montre la figure 2.2. Ces niveaux verticaux sont plus resserrés près de la surface, pour obtenir une meilleure description des processus de couche limite (figure 2.3).

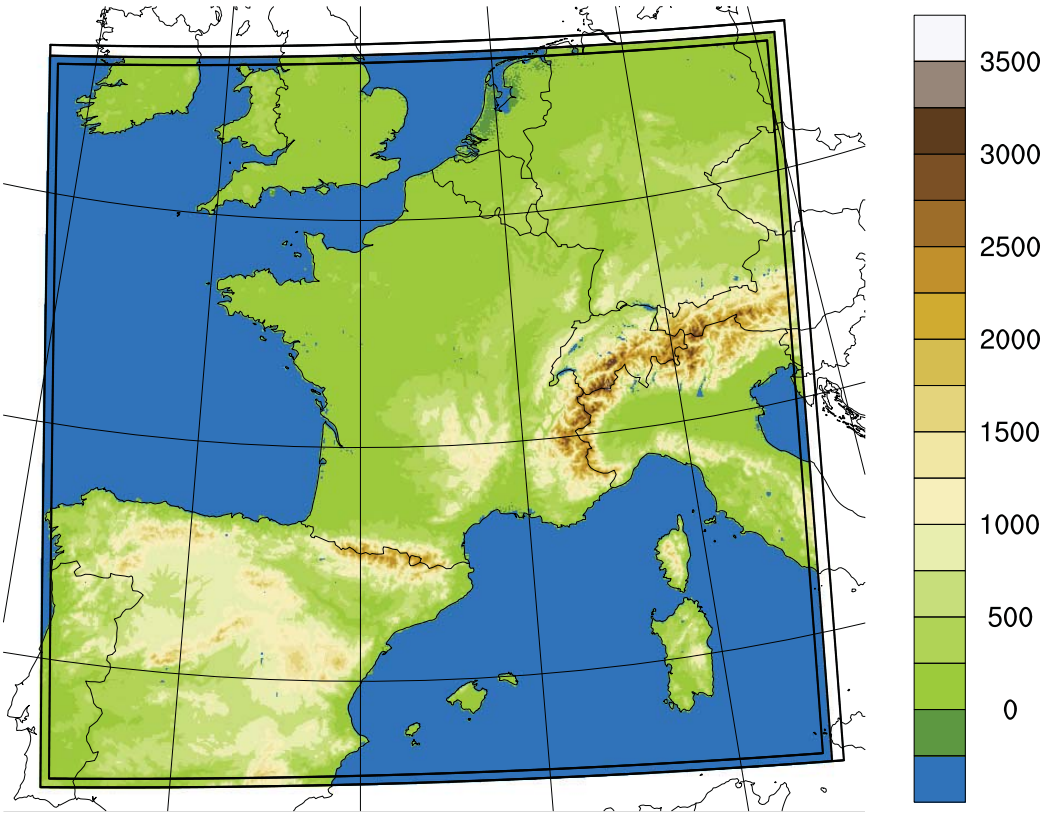


Figure 2.1. – Domaine et relief du modèle AROME au printemps 2014. Les zones C, I et E sont indiquées par les cadres noirs.

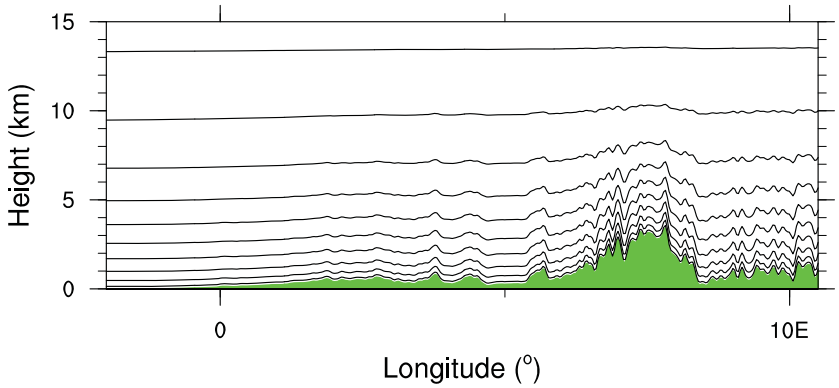


Figure 2.2. – Niveaux verticaux hybrides du modèle AROME le long de la latitude 45,5°N (1 niveau sur 5 représenté).

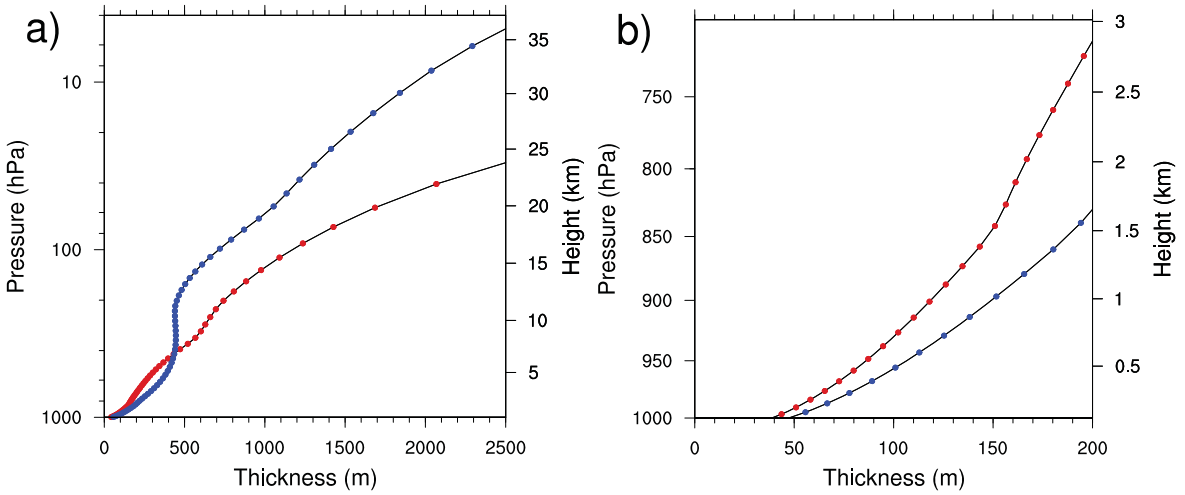


Figure 2.3. – Epaisseurs des niveaux des modèles AROME (en rouge) et ARPEGE (en bleu), jusqu'à 35 km (a) et dans la couche de surface (b).

Les conditions aux limites latérales et supérieures d'AROME sont fournies par le modèle global opérationnel ARPEGE (Action de Recherche Petite Echelle Grande Echelle). Ce modèle intègre les équations primitives hydrostatiques par un schéma semi-implicite semi-lagrangien pseudo-spectral (harmoniques sphériques à troncature triangulaire), les précipitations étant paramétrisées (Courtier *et al.*, 1991). La maille du modèle ARPEGE est étirée (Courtier et Geleyn, 1988), variant avec la troncature et l'étirement actuels (T798, C2.4) de 15 km sur la France à 60 km aux antipodes (cf. figure 2.4). La discrétisation verticale d'ARPEGE, sur 70 niveaux, est plus lâche que celle d'AROME près de la surface, mais plus précise au-dessus de 7 km, comme le montre la figure 2.3. Les interactions d'AROME avec la surface sont externalisées dans le code SURFEX.

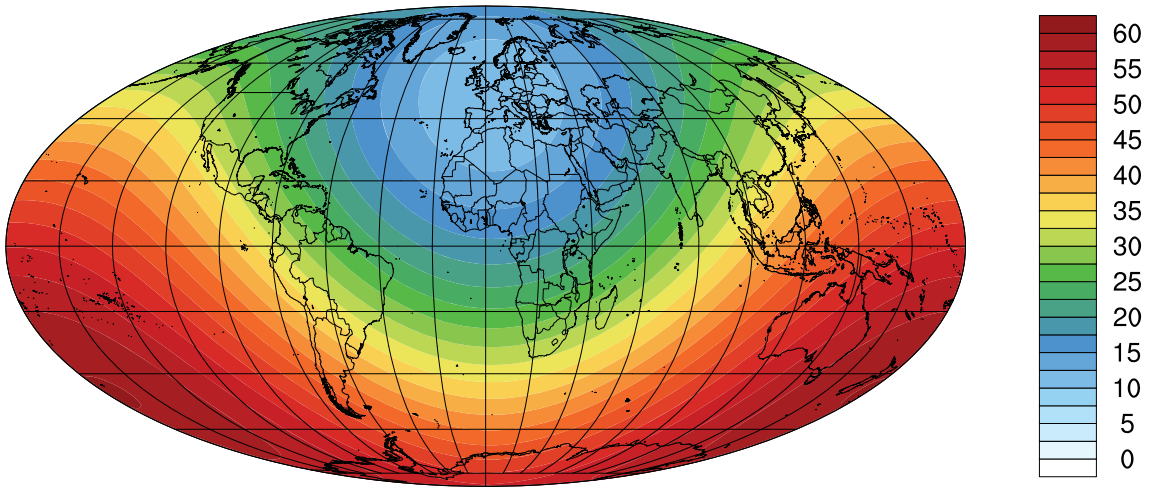


Figure 2.4. – Résolution locale (en km) du modèle ARPEGE en troncature T798, étirement C2.4.

2.1.2. Systèmes d'assimilation

Système d'assimilation d'AROME

Le modèle AROME possède un schéma d'assimilation 3D-Var incrémental préconditionné en $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}$, cyclé toutes les 3 h. La matrice $\overline{\mathbf{B}}$ a été calibrée par Brousseau *et al.* (2011) à partir d'une assimilation d'ensemble de 6 membres lancée pendant 4 semaines (des détails sur cette méthodologie sont donnés dans la suite). Au cours de la fenêtre d'assimilation de 3 h (± 1 h 30 de part et d'autre de l'analyse), toutes les observations sont considérées valides au centre de la fenêtre. Des prévisions à 30 h d'échéance sont lancées par les quatre réseaux synoptiques (0 h, 6 h, 12 h et 18 h UTC).

Comme on peut le voir sur la figure 2.5, différents types d'observations sont assimilés : outre les observations conventionnelles (mesures au sol, par avion, radiosondages, profileurs de vent, etc.), de nombreuses observations satellites sont prises en compte dans l'infrarouge ou les micro-ondes. On citera notamment les radiances infrarouges IASI (Guidard *et al.*, 2011) et les radiances SEVIRI du satellite géostationnaire Meteosat 10 (Montmerle *et al.*, 2007). Comparativement à ARPEGE, AROME présente de plus la particularité d'assimiler les données des 24 radars du réseau national ARAMIS : vitesses radiales (Montmerle et Faccani, 2009) et réflectivités (Wattrelot *et al.*, 2014). Pour une journée pluvieuse, Brousseau *et al.* (2014) ont montré que ce dernier type de données jouait un rôle prépondérant dans l'analyse de la troposphère haute et moyenne en expliquant près de 40 % de la réduction de la variance d'erreur d'ébauche pour le vent et l'humidité.

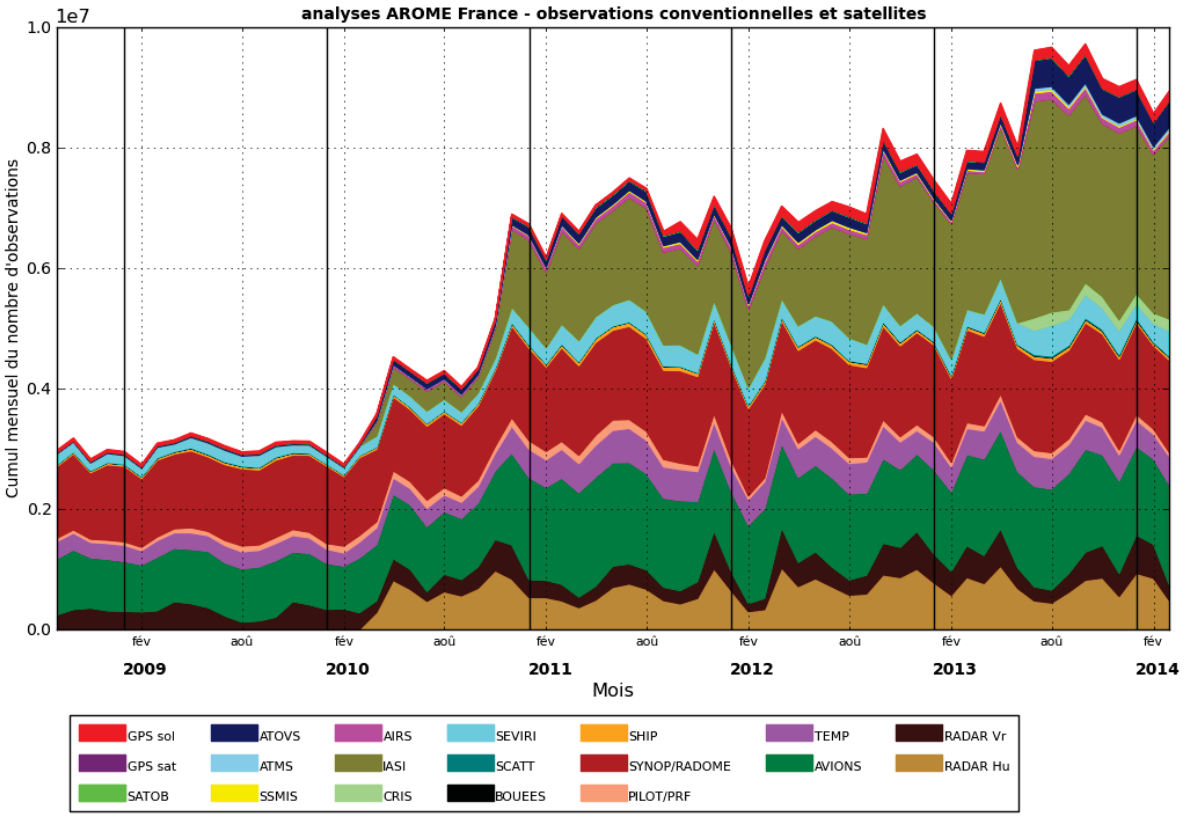


Figure 2.5. – Évolution des cumuls mensuels de nombre d'observations utilisées, par type d'observation.

Variable de contrôle d'AROME

La variable de contrôle regroupe les incréments de vorticité $\delta\zeta$, divergence $\delta\eta$, de température δT et de pression de surface δp_s, ainsi que d'humidité spécifique δq :

$$\delta\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \delta\zeta \\ \delta\eta \\ \{\delta T, \delta p_s\} \\ \delta q \end{pmatrix} \tag{2.1}$$

Comme il est expliqué dans Seity *et al.* (2011), les autres champs du modèle (énergie cinétique turbulente, écart de pression, divergence verticale et hydrométéores) sont donc simplement cyclés à partir de l'ébauche. Pour les raisons explicitées dans la section 1.3.3, un opérateur de balance climatologique et homogène $\overline{\mathbf{K}}_p$, formulé dans l'espace spectral, permet de transformer la variable de contrôle (équation 1.43) :

$$\begin{pmatrix} \delta\zeta \\ \delta\eta \\ \{\delta T, \delta p_s\} \\ \delta q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 & 0 & 0 \\ \mathcal{MH} & \mathbf{I} & 0 & 0 \\ \mathcal{NH} & \mathcal{P} & \mathbf{I} & 0 \\ \mathcal{QH} & \mathcal{R} & \mathcal{S} & \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\widetilde{\zeta} \\ \delta\widetilde{\eta}_u \\ \{\delta\widetilde{T}, \delta\widetilde{p}_s\}_u \\ \delta\widetilde{q}_u \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

Cette formulation, décrite par Berre (2000), repose sur celle de Derber et Bouttier (1999) mais avec une relation multivariée additionnelle pour δq. Elle suppose que les erreurs associées aux champs balancés (modes de Rossby) sont en grande partie décorrélées des erreurs associées aux champs non balancés (modes d'inertie-gravité, notés avec un tilde). D'après Parrish *et al.* (1997), la vorticité ζ en équilibre géostrophique est reliée au champ de masse Φ par :

$$\Phi = \nabla^{-2}(\nabla \cdot f\nabla)\nabla^{-2}\zeta \tag{2.3}$$

où f est le paramètre de Coriolis. Ce champ de masse est identifié dans Derber et Bouttier (1999) à la masse totale linéarisée P_t, donnée au niveau i_{lev} par :

$$P_t(i_{\text{lev}}) = \sum_{i=i_{\text{surf}}}^{i_{\text{lev}}} RT_i \Delta\log(p_i) + RT_{\text{ref}}\log(p_s) \tag{2.4}$$

où i_{surf} est l'indice du niveau de surface, R la constante des gaz parfaits, $\Delta\log(p_i)$ l'épaisseur du niveaux du modèle i en logarithme de la pression, et T_{ref} une température de référence.

L'opérateur $\mathcal{H}$ est une régression linéaire spectrale horizontale entre l'incrément de vorticité $\delta\zeta$ et celui de masse totale linéarisée δP_t. Ainsi, chaque coefficient spectral du champ de masse totale linéarisée $\delta P_t(k,l)$ est calculé en multipliant le coefficient spectral de la vorticité $\delta\zeta(k,l)$ par $\mathcal{H}(k^\star)$ où $k^\star$ est le nombre d'onde total correspondant au couple des nombres d'onde horizontaux (k,l). Cette régression est identique pour tous les niveaux verticaux.

Le champ de masse totale linéarisée ainsi obtenu à partir de la vorticité est relié par la régression spectrale $\mathcal{M}$ à la divergence balancée, le résidu étant la divergence non balancée $\delta\widetilde{\eta}_u$. De même, l'opérateur de régression $\mathcal{N}$ relie le champ de masse totale linéarisée à une première partie balancée de la température et de la pression de surface $(\delta T, \delta p_s)$, tandis qu'une seconde partie est reliée à la divergence non balancée via l'opérateur de régression $\mathcal{P}$, donnant un résidu non balancé de la température et de la pression de surface $\{\delta\widetilde{T}, \delta\widetilde{p}_s\}_u$. L'incrément d'humidité

spécifique $\delta\widetilde{q}$ est enfin relié à la masse totale linéarisée et aux composantes non balancées $\delta\widetilde{\eta}_u$ et $\{\delta\widetilde{T}, \delta\widetilde{p}_s\}_u$, respectivement par les opérateurs $\mathcal{Q}$, $\mathcal{R}$ et $\mathcal{S}$, donnant un résidu non balancé $\delta\widetilde{q}_u$.

Les opérateurs $\mathcal{M}$, $\mathcal{N}$, $\mathcal{P}$, $\mathcal{Q}$, $\mathcal{R}$ et $\mathcal{S}$ sont construits pour imposer des corrélations verticales, également dans l'espace spectral. Pour chaque couple (k, l) de nombre d'onde total $k^\star$, l'opérateur $\mathcal{M}(k^\star, z, z')$ donne ainsi la corrélation entre la masse totale linéarisée au niveau z et la divergence balancée au niveau z' .

Les matrices d'autocovariance $\overline{\mathbf{B}}_{s,i}$ sont également climatologiques et sont appliquées sur les variables non balancées par la relation 1.46. Elles sont modélisées grâce à l'hypothèse diagonale spectrale (Berre, 2000), et sont donc homogènes et isotropes dans l'espace physique. Leurs racines carrées se décomposent pour une variable $\widetilde{\chi}_i$ donnée en :

$$\overline{\mathbf{B}}_{s,i}^{1/2} = \Sigma_i \mathbf{S}^{\mathrm{T}} \mathbf{W}_i^{1/2} \mathbf{E}_i \mathbf{D}_i^{1/2} \tag{2.5}$$

Les écarts-types moyens appliqués à chaque niveau vertical sont contenus dans la matrice Σ_i. $\mathbf{S}$ est une transformation spectrale horizontale, niveau par niveau. Les corrélations horizontales sont représentées dans l'espace spectral, niveau par niveau, par l'opérateur diagonal $\mathbf{W}_i^{1/2}$. L'opérateur $\mathbf{E}_i$ permet de projeter le vecteur dans une base de modes propres verticaux (EOF), différente pour chaque nombre d'onde total $k^\star$, et la matrice diagonale $\mathbf{D}_i^{1/2}$ contient les écarts-types de chaque mode vertical pour chaque nombre d'onde total $k^\star$. Ainsi, la matrice $\mathbf{S}^{\mathrm{T}} \mathbf{W}_i^{1/2} \mathbf{E}_i \mathbf{D}_i \mathbf{E}_i^{\mathrm{T}} \mathbf{W}_i^{\mathrm{T}/2} \mathbf{S}$ est une matrice de corrélation tridimensionnelle non séparable, dont les termes diagonaux sont normalisés à 1.

Système d'assimilation d'ARPEGE

Le système d'assimilation du modèle ARPEGE est basé sur un schéma 4D-Var à contrainte forte multi-incrémental préconditionné en $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}$, cyclé par fenêtres de 6 h (± 3 h de part et d'autre de l'analyse). Deux boucles de minimisations successives sont effectuées, la première à la troncature T107 et la seconde à la troncature T323, sans étirement et avec une physique simplifiée. Les incréments finaux sont interpolés en T798, étirement C2.4, puis ajoutés à l'ébauche pour constituer l'analyse d'altitude. Les mêmes observations que pour AROME sont assimilées, à l'exception des données radars, les données SEVIRI étant considérées à plus basse résolution.

Variable de contrôle d'ARPEGE

La variable de contrôle ARPEGE est identique à celle d'AROME. Cependant, l'opérateur de balance est partiellement dépendant à l'écoulement grâce à des relations de balance linéarisées autour de la référence, mais ne tient pas compte de l'humidité spécifique dont l'erreur est supposée décorrélée des autres variables ($\mathcal{Q} = \mathcal{R} = \mathcal{S} = 0$ dans l'équation 2.2).

Les matrices d'autocovariance sont partiellement dépendantes à l'écoulement, l'équation 2.5 étant remplacée par :

$$\overline{\mathbf{B}}_{s,i}^{1/2} = \mathbf{V}_i^{1/2} \mathbf{S}^{\mathrm{T}} \mathbf{W}_i^{1/2} \mathbf{E}_i \mathbf{D}_i^{1/2} \tag{2.6}$$

Ceci permet d'appliquer les écarts-types dans l'espace physique par la matrice diagonale $\mathbf{V}_i^{1/2}$. Ces écarts-types sont calculés à partir d'un ensemble d'assimilation de six membres (AEARP, cf. section suivante), et filtrés spectralement (Raynaud *et al.*, 2009). Depuis 2012, l'opérateur $\mathbf{W}^{1/2}$ des corrélations horizontales présente également une certaine dépendance à l'écoule-

ment, grâce à une représentation sur la base d'ondelettes calibrées sur 4 jours d'assimilation d'ensemble d'AEARP (Varella *et al.* (2011), détails dans la suite).

2.1.3. Assimilations d'ensemble

Pour simuler les erreurs d'ébauche du cycle d'assimilation déterministe, la stratégie à Météo-France à l'échelle globale est de mettre en œuvre une assimilation d'ensemble basée sur ARPEGE, pour laquelle les membres perturbés ont des caractéristiques les plus proches possible du cycle d'assimilation déterministe opérationnel, comme décrit dans le chapitre 1 :

- même modèle,
- même schéma d'assimilation, toutefois à des résolutions différentes,
- mêmes observations, perturbées aléatoirement en utilisant les covariances d'erreur d'observation modélisées $\overline{\mathbf{R}}$.

Cette assimilation d'ensemble (appelée AEARP, Berre *et al.* (2006); Berre et Desroziers (2010)) a lieu à plus basse résolution que le cycle d'assimilation déterministe (T399 et C1.0, soit une résolution horizontale de 50 km). Pour améliorer la dispersion de l'ensemble, une inflation multiplicative des prévisions perturbées est réalisée à chaque cycle (Raynaud *et al.*, 2012), qui éloigne les membres de leur valeur moyenne sans modifier celle-ci. Ceci suppose implicitement que les covariances d'erreur de modèle soient proportionnelles aux covariances d'erreur d'ébauche, or l'erreur de modèle ne dépend pas du réseau d'observation, contrairement à l'erreur d'ébauche (Whitaker et Hamill, 2012). L'inflation multiplicative ne pallie donc qu'en partie l'absence d'erreur de modèle dans la dynamique des perturbations.

Une version expérimentale de l'assimilation d'ensemble a été mise en place pour le modèle AROME (appelée AEARO). Ce système utilise des conditions aux limites perturbées provenant des membres de l'AEARP. Dans la suite de ce chapitre, aucune inflation n'est appliquée aux prévisions de l'AEARO.

2.1.4. Mise en place des grands ensembles

La période retenue pour les expériences d'assimilation d'ensemble est caractérisée par des conditions fortement perturbées sur la France, comme l'illustre la figure 2.6 : une dépression large et intense, associée à un minimum de pression sur le nord-est de l'Atlantique et à un fort courant-jet, advecte de l'air humide instable depuis la mer Méditerranée vers le sud de la France. Comme on peut le voir sur la figure 2.7, ceci provoque pour ARPEGE comme pour AROME des contrastes marqués entre les fortes valeurs d'humidité spécifique sur la mer Méditerranée, des valeurs intermédiaires sur la France et des valeurs faibles sur le nord de l'Espagne et l'Allemagne. L'interaction de cet air très humide et instable de Méditerranée avec le relief génère alors de fortes précipitations au sud-est du Massif Central (2.8). Une grande partie du domaine AROME est aussi sujette à des systèmes orageux organisés, particulièrement le long d'un axe nord/sud sur la France.

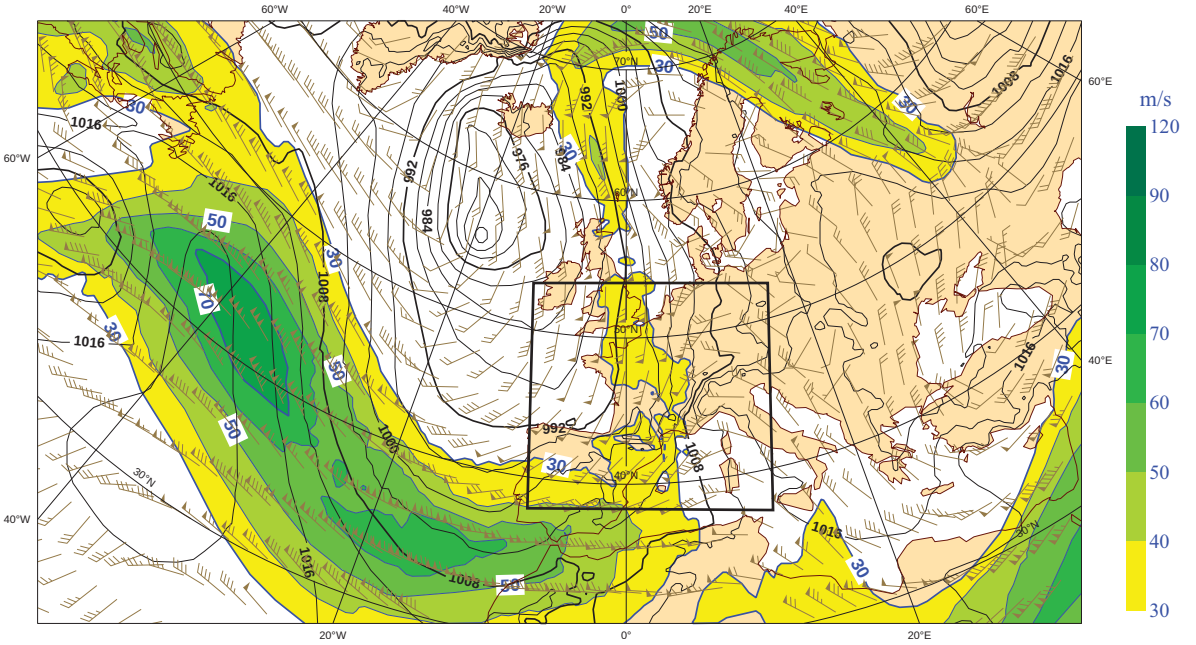


Figure 2.6. – Analyse ARPEGE à 18 h UTC le 3 novembre 2011. Pression de surface au niveau de la mer (isolignes noires, unité : hPa) et vitesse du vent à 200 hPa (palette de couleur, unité : m.s^{-1}). Le domaine AROME est indiqué par un cadre noir.

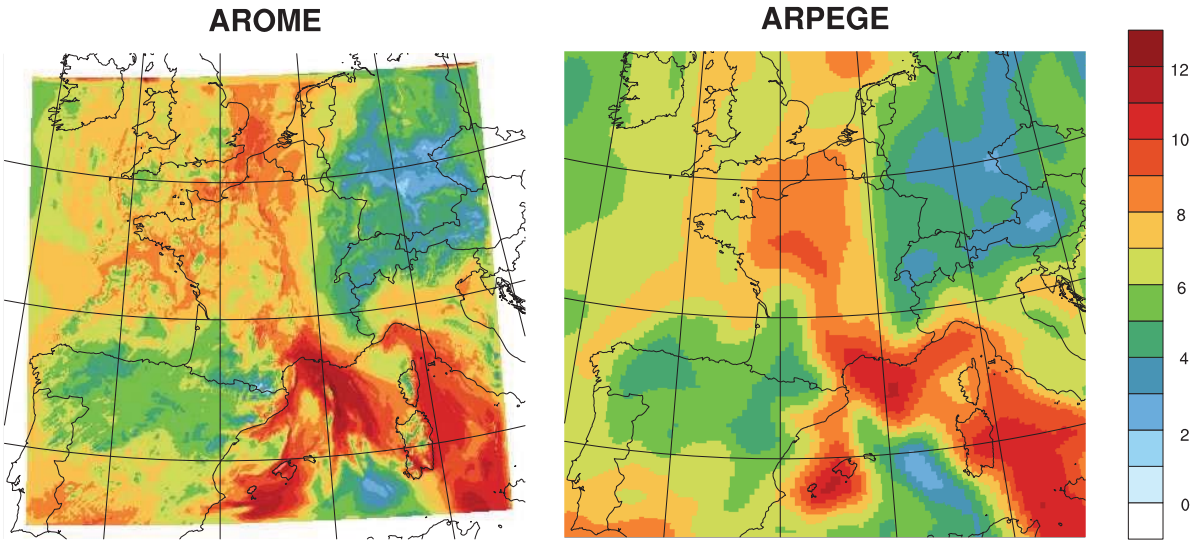


Figure 2.7. – Prévision à 3 h du champ d'humidité spécifique (unité : g.kg^{-1}) au niveau 50 d'AROME (à gauche) et au niveau 62 d'ARPEGE (à droite), soit aux environs de 945 hPa, issus des analyses perturbées (premiers membres des ensembles AEARO et AEARP respectivement) lancées le 3 novembre 2011 à 18 h UTC.

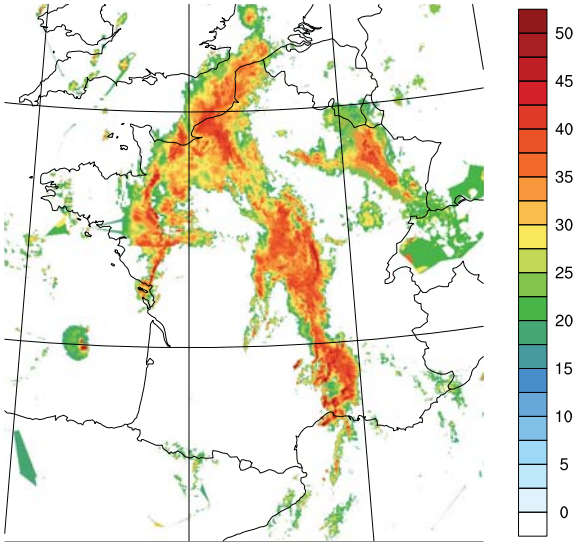


Figure 2.8. – Image composite de réflectivité radar du réseau ARAMIS, le 3 novembre 2011 à 21 h UTC (unité : dBZ).

L'ensemble AEARP de 90 membres a été mis en place par Yann Michel et démarré le 1er novembre 2011 à 0 h UTC, en dupliquant 15 fois les 6 membres de l'AEARP opérationnelle. Chacun des membres assimile des observations perturbées, ce qui permet de différencier rapidement les membres initialement similaires. L'ensemble AEARO de 90 membres est démarré le 3 novembre 2011 à 9 h UTC, en dupliquant 90 fois l'analyse opérationnelle. Grâce aux perturbations des observations et des conditions aux limites fournies par l'AEARP, sa dispersion augmente rapidement, comme le montre la figure 2.9. Les prévisions à 3 h d'échéance émises entre le 3 novembre 2011 à 18 h UTC et le 4 novembre 2011 à 3 h UTC sont utilisées pour estimer les différentes caractéristiques de l'erreur d'ébauche. À défaut d'indication contraire, les cartes et les spectres correspondent dans la suite aux prévisions issues de l'analyse du 3 novembre 2011 à 18 h UTC, tandis que les scores sont moyennés sur les 4 cycles utilisables.

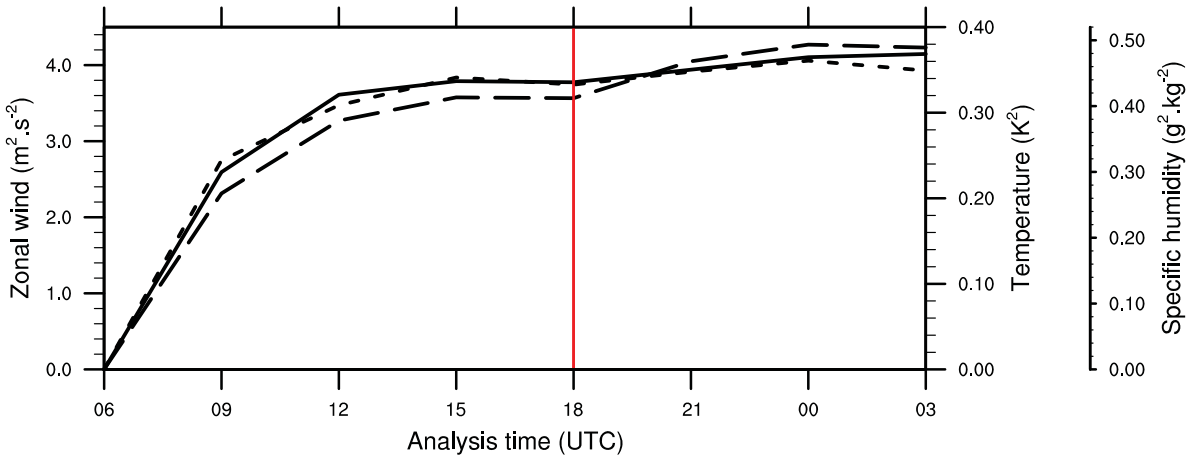


Figure 2.9. – Variances moyennes de prévisions à 3 h d'échéance au niveau 50 d'AROME ($\sim$ 945 hPa) de la prévision à 3 h d'échéance, pour le vent zonal (trait plein), la température (tireté) et l'humidité spécifique (pointillés) en fonction du réseau d'analyse. La ligne verticale indique la date à partir de laquelle l'ensemble est considéré comme mature.

2.2. Spécificités de l'erreur d'ébauche à échelle convective

Cette section est basée sur l'article Ménétrier, Montmerle, Berre et Michel (2014a) paru dans le *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society*.

2.2.1. Contexte expérimental

Objectif

L'objectif de cette expérience est d'examiner les connexions entre les covariances d'erreur d'ébauche et la situation météorologique, d'évaluer les effets du bruit d'échantillonnage, et de comparer les estimations de ces mêmes covariances fournies par les ensembles AEARO et AEARP. Les grandeurs estimées sont les variances d'erreur d'ébauche, ainsi que les tenseurs LCH (Local Correlation Hessian), dont la définition est donnée dans l'annexe A.1.1.

Comme on l'a détaillé dans la section précédente, les ensembles AEARO et AEARP ont été conçus pour simuler l'évolution des erreurs de deux systèmes d'assimilation très différents : un 3D-Var régional à haute résolution et un 4D-Var global. En raison de ces différences, la comparaison entre les estimations données par AEARO et AEARP doit être effectuée avec précaution. Les estimations issues de l'AEARP sont interpolées horizontalement et verticalement sur la grille AROME, pour faciliter la comparaison avec les estimations AEARO.

Outils d'évaluation

Les aspects concernant le bruit d'échantillonnage sont étudiés en comparant des ensembles indépendants de 6 et 84 membres, les estimations issues de l'ensemble AEARO à 84 membres servant de référence (notées avec l'exposant "ref"). Le bruit d'échantillonnage est bien sûr présent dans cette référence, qui est néanmoins jugée satisfaisante (cf. section 5.1.2 pour plus de détail). Afin de comparer les différents ensembles, les estimations représentées de façon générique par le vecteur $\widetilde{\mathbf{p}}$ de taille n sont soumises aux diagnostics suivants :

— moyenne spatiale :

$$\mu^{\mathrm{s}}(\widetilde{\mathbf{p}}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\widetilde{p}_i \tag{2.7}$$

— corrélation spatiale par rapport à la référence :

$$\mathrm{cor}(\widetilde{\mathbf{p}}, \widetilde{\mathbf{p}}^{\mathrm{ref}}) = \frac{1/(n-1)\sum_{i=1}^{n}\left(\widetilde{p}_i - \mu^{\mathrm{s}}(\widetilde{\mathbf{p}})\right)\left(\widetilde{p}_i^{\mathrm{ref}} - \mu^{\mathrm{s}}(\widetilde{\mathbf{p}}^{\mathrm{ref}})\right)}{\sigma(\widetilde{\mathbf{p}})\sigma(\widetilde{\mathbf{p}}^{\mathrm{ref}})} \tag{2.8}$$

où $\sigma(\widetilde{\mathbf{p}})$ est l'écart-type spatial :

$$\sigma(\widetilde{\mathbf{p}})^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}\left(\widetilde{p}_i - \mu^{\mathrm{s}}(\widetilde{\mathbf{p}})\right)^2 \tag{2.9}$$

2.2.2. Diagnostic expérimental des variances d'erreur d'ébauche

Exemples de dépendance à l'écoulement

Les variances estimées dans les différentes configurations sont montrées dans la figure 2.10, pour l'humidité spécifique autour de 945 hPa. Comme l'humidité de basse couche joue un grand rôle dans le déclenchement et l'alimentation de l'activité convective, les variances d'erreur de ce paramètre sont particulièrement intéressantes à examiner.

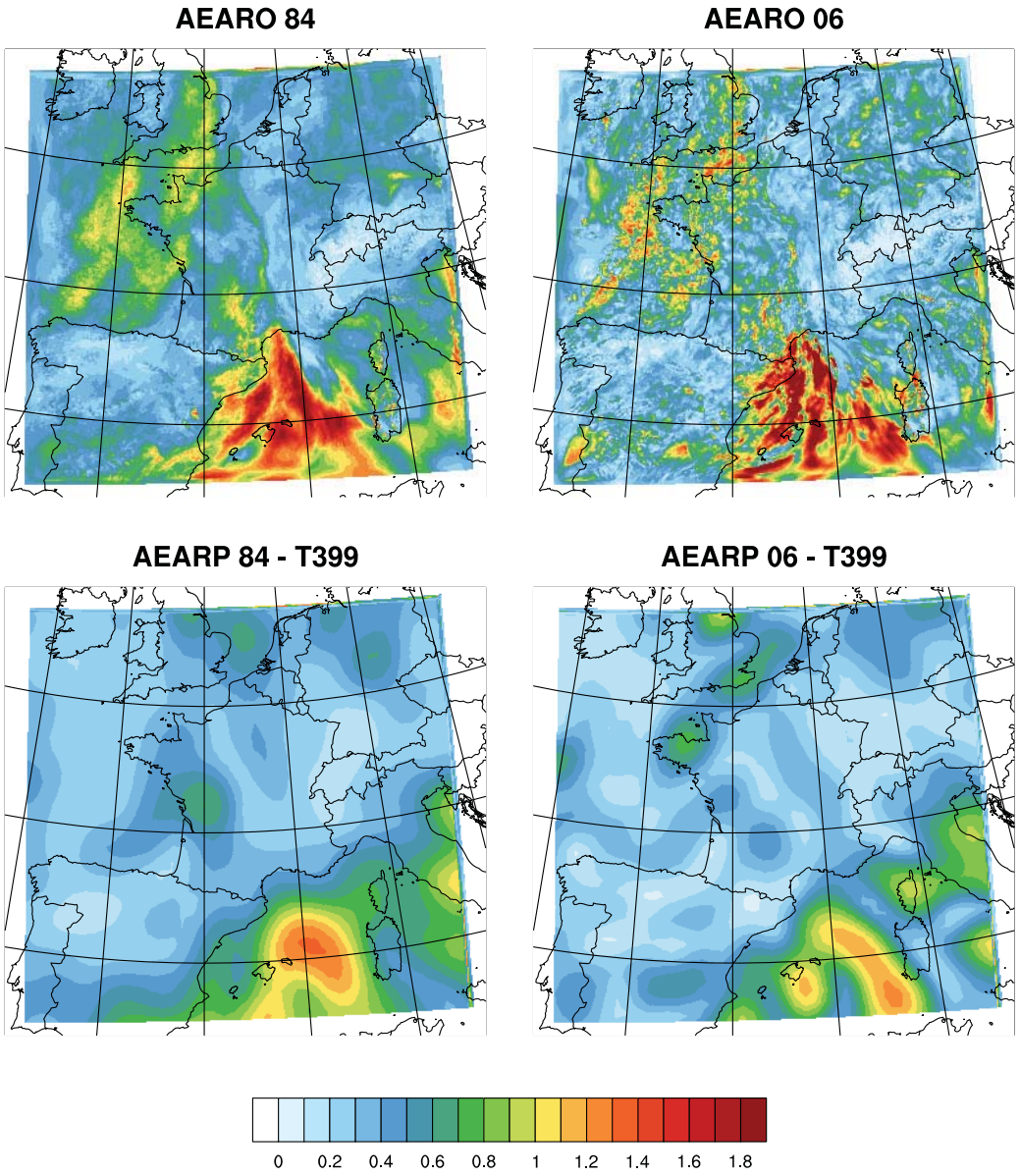


Figure 2.10. – Ecart-types de l'erreur d'ébauche d'humidité spécifique (unité : g.kg^{-1}) au niveau 50 d'AROME (en haut) et au niveau 62 d'ARPEGE (en bas), soit aux environs de 945 hPa, pour des ensembles de 84 membres (à gauche) ou de 6 membres (à droite).

Comme on peut le voir sur la carte de référence en haut à gauche (AEARO-84), une zone de variances élevées s'étend sur le nord-ouest de la Méditerranée, ce qui contraste avec les faibles valeurs généralement observées sur le continent, bien que des valeurs plus élevées correspondant à des maxima locaux soient visibles dans le sud-ouest de la France, et en partie le long de la principale ligne d'orages qui traverse la France. Les variances élevées sur la Méditerranée sont associées à des masses d'air maritime chaud, où la quantité de vapeur de vapeur d'eau est élevée, comme on peut le voir sur la figure 2.7. Les erreurs de phase et d'amplitude du champ d'humidité spécifique dans ces zones humides génèrent donc de fortes variances d'erreur d'ébauche. Ceci peut être comparé aux variances d'erreur plus faibles dans des zones relativement plus sèches, par exemple sur la France ou plus encore sur le nord de l'Espagne et sur

les Alpes. Les valeurs intermédiaires de variance d'erreur au-dessus du sud-ouest de la France reflètent probablement les incertitudes dans la prévision de la zone de convergence d'humidité de basse couche, au voisinage des zones convectives.

Les estimations données par l'ensemble AEARO-84 peuvent être comparées à celles données par l'AEARP-84 (en bas à gauche de la figure 2.10). D'une part, le contraste de grande échelle entre les fortes variances sur la Méditerranée et les plus faibles valeurs à terre est aussi visible dans le champ de l'AEARP-84, ce qui est cohérent avec les grandes quantités de vapeur d'eau présentes dans la masse d'air maritime représentée par ARPEGE (figure 2.7). D'autre part, les maxima locaux de variance sur le sud-ouest de la France ne sont pas visibles avec l'AEARP-84. Ceci est probablement dû à la différence de résolution spatiale entre les deux modèles, qui implique en particulier que les précipitations orographiques sont paramétrisées en non explicites dans le cas d'ARPEGE, dont la résolution est plus faible.

Enfin, on note que de fortes variances sont amplifiées localement pour l'AEARO le long des bords sud et est du domaine, probablement en raison d'artefacts dus au couplage.

Bruit d'échantillonnage

La carte en haut à droite de la figure 2.10 (AEARO-06), peut être comparée à celle de gauche (AEARO-84), pour étudier le bruit d'échantillonnage associé à l'estimation des variances avec 6 membres seulement. D'une part, les structures de grande échelle de l'AEARO-84 sont bien visibles dans l'estimation AEARO-06, comme la large zone de fortes variances d'erreur sur la Méditerranée. D'autre part, on peut observer de nombreuses structures de petite échelle dans l'AEARO-06 qui n'ont pas de contreparties dans l'AEARO-84, par exemple en ce qui concerne l'amplitude, la localisation et l'extension des maxima locaux dans le nord-ouest de la France. Ceci suggère que le bruit d'échantillonnage est d'échelle relativement petite par rapport au signal d'intérêt.

Cette constatation est renforcée par les spectres d'énergie de l'AEARO-06 et de l'AEARO-84, donnés par la figure 2.11. Les différences entre ces deux spectres peuvent être interprétées comme du bruit d'échantillonnage affectant l'estimation AEARO-06. Il apparaît ainsi que le rapport signal sur bruit est relativement élevé à grande échelle, et relativement faible à petite échelle, l'écart entre les deux courbes étant plus important. Ceci confirme qu'un filtrage spatial pourrait être bénéfique pour réduire le bruit d'échantillonnage.

Le bruit d'échantillonnage peut aussi être étudié pour l'AEARP, en comparant les estimations de l'AEARP-06 et de l'AEARP-84 sur la figure 2.10. D'une part, le fort contraste entre la Méditerranée et le continent est encore visible pour l'AEARP-06. D'autre part, la structure spatiale des variances de l'AEARP-06 sur la Méditerranée semble plus lacunaire que pour l'AEARP-84. Ceci confirme, dans le contexte de l'AEARP, que le bruit d'échantillonnage est d'échelle plus fine que le signal.

La figure 2.11 permet également de constater que le bruit d'échantillonnage est de plus grande échelle pour l'AEARP que pour l'AEARO (décalage entre les courbes à plus grande longueur d'onde pour l'AEARP). Ainsi, on retrouve un résultat théorique de Raynaud *et al.* (2009), montrant que l'échelle caractéristique du bruit d'échantillonnage sur les variances est proportionnelle à la portée des corrélations de l'erreur d'ébauche. Or, en raison des différences de résolution entre les modèles, celle-ci est plus grande pour ARPEGE que pour AROME.

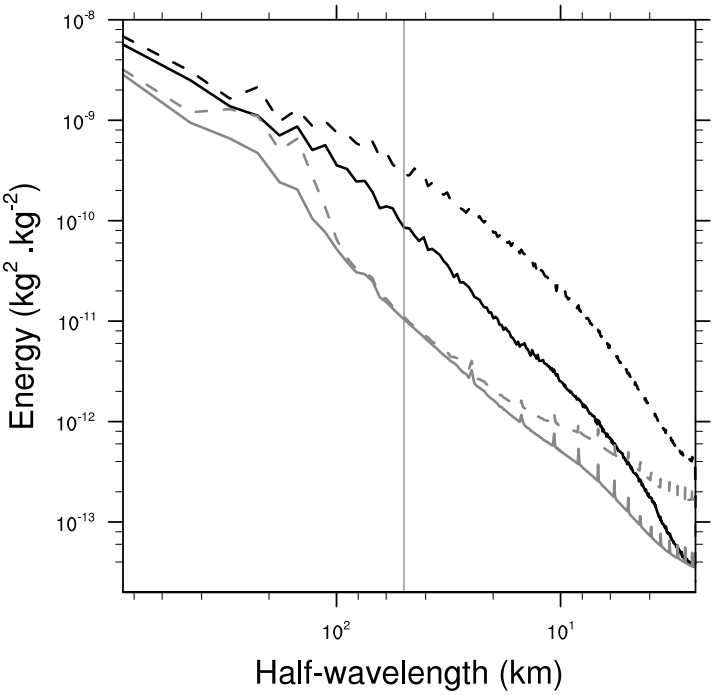


Figure 2.11. – Spectres d'énergie des variances d'erreur d'ébauche de l'humidité spécifique moyennés verticalement. Les systèmes AEARO et AEARP sont représentés (lignes noires et grises, respectivement), pour des ensembles de 84 ou 6 membres (trait plein et tireté, respectivement). N.B. : pour les spectres de l'AEARP, les échelles en-dessous de 50 km (ligne verticale) sont déterminées par l'interpolation sur la grille AROME, et ne sont donc pas vraiment pertinentes.

Moyennes horizontales des variances

Les profils verticaux de la racine carrée de la moyenne horizontale des variances d'erreur d'ébauche sont donnés par la figure 2.12. En raison des phénomènes intenses ayant lieu pendant la période retenue, les variances moyennes de l'AEARO sont plus élevées que les valeurs climatologiques (pas d'illustration) utilisées dans le 3D-Var opérationnel AROME, et qui ont été estimées pendant une période de printemps en partie anticyclonique et sèche (Brousseau *et al.*, 2011). Pour l'humidité spécifique, cela reflète aussi le lien entre la quantité de vapeur d'eau présente dans l'atmosphère et les variances d'erreurs d'ébauche.

Une comparaison préliminaire des variances d'erreur d'ébauche AEARO avec des diagnostics basés sur les observations (Desroziers *et al.*, 2005) a aussi été effectuée (pas d'illustration). L'hypothèse de modèle parfait de l'ensemble AROME a comme conséquence une sous-estimation d'un facteur 2 environ des variances d'erreur, ce qui est cohérent avec des études précédentes sur des modèles globaux (Houtekamer *et al.*, 2009; Raynaud *et al.*, 2012).

La comparaison des profils AROME et ARPEGE montre que les variances moyennes sont plus élevées pour l'AEARO. Il faut noter que les variances ARPEGE montrées ici ont été calculées avant inflation (d'environ 20%). Ceci est cohérent avec les études précédentes montrant l'impact de la résolution sur les variances d'erreur d'ébauche moyennes (Stefanescu *et al.*, 2006; Brousseau *et al.*, 2011). Cette augmentation de variance pour l'AEARO peut ainsi être interprétée comme une contribution des structures de petite échelle, qui ne sont pas représentées dans ARPEGE (échelles inférieures à 50 km, cf. figure 2.11). En accord avec les études citées

(figure 3 de Stefanescu *et al.* (2006) et figure 2 de Brousseau *et al.* (2011)), cette augmentation de variance est beaucoup plus prononcée pour la vorticité et la divergence que pour le vent, la température et l'humidité. Ceci s'explique par la nature de la vorticité, basée sur les dérivées spatiales du vent, et qui est donc bien plus sensible à la résolution spatiale du modèle que le vent lui-même.

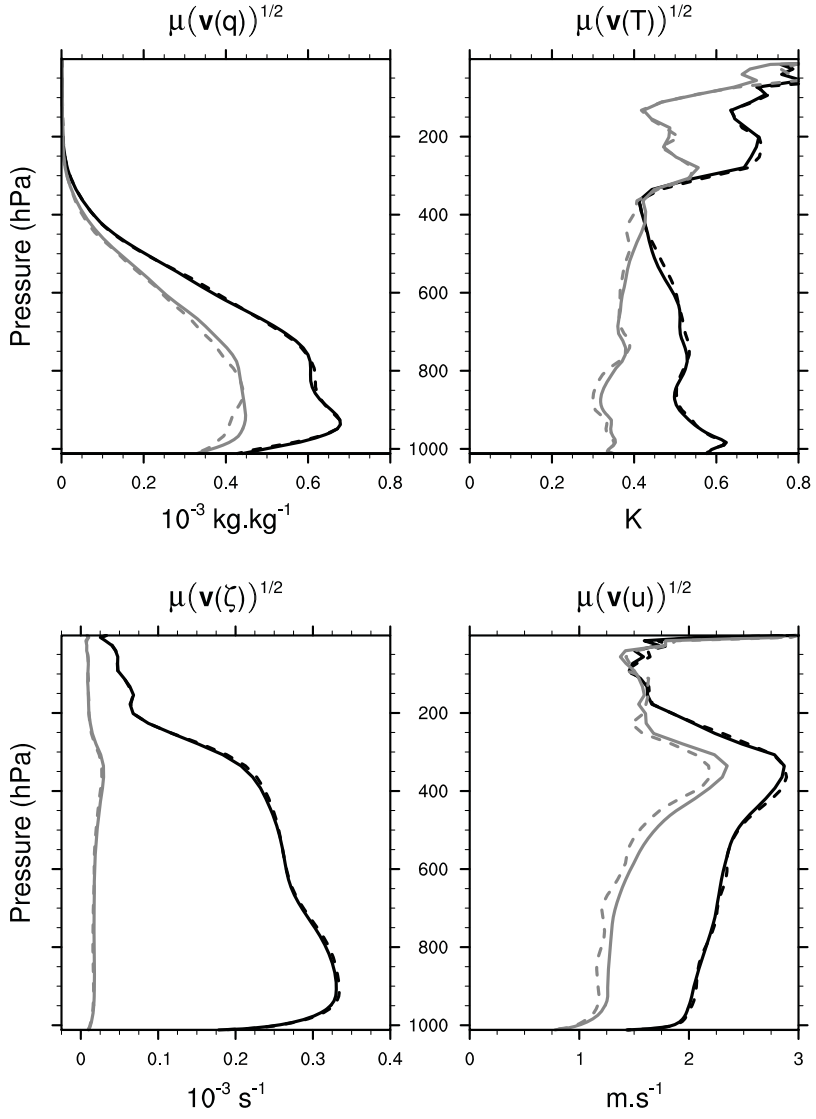


Figure 2.12. – Racine carrée de la moyenne horizontale des variances d'erreur d'ébauche, pour l'AEARO-84 (trait plein noir), l'AEARO-06 (tireté noir), l'AEARP-84 (trait plein gris) et l'AEARP-06 (tireté gris). L'humidité spécifique (q), la température (T), la vorticité (ζ) et le vent zonal (u) sont représentés.

Corrélation horizontale entre les variances

Les profils verticaux de corrélation spatiale entre les variances AEARO-84 qui servent de référence et les autres estimations sont donnés par la figure 2.13. Les valeurs de corrélation entre l'AEARO-84 et l'AEARO-06 varient typiquement entre 0,6 et 0,8, ce qui indique que l'ensemble à 6 membres saisit une part relativement importante du signal présent dans l'ensemble à 84 membres.

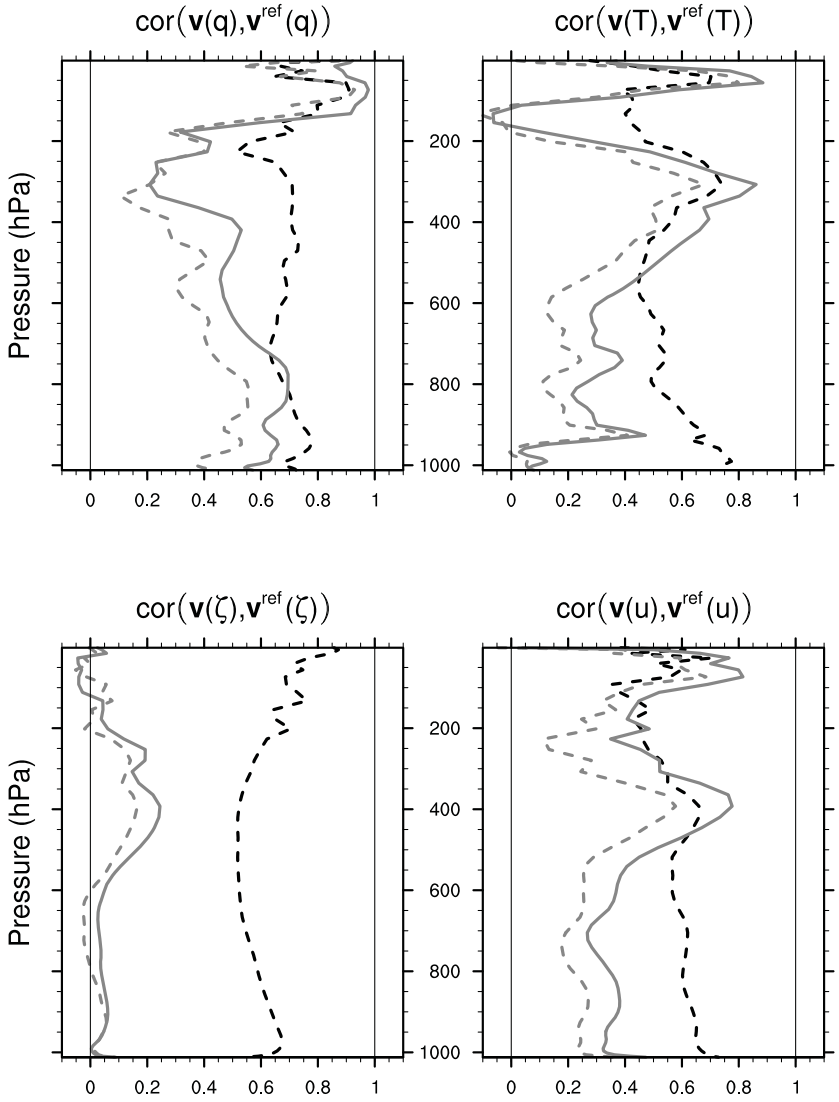


Figure 2.13. – Corrélation spatiale des variances d'erreur d'ébauche par rapport à l'AEARO-84, pour l'AEARO-06 (tireté noir), l'AEARP-84 (trait plein gris) et l'AEARP-06 (tireté gris). L'humidité spécifique (q), la température (T), la vorticité (ζ) et le vent zonal (u) sont représentés.

Il est intéressant d'examiner les corrélations spatiales entre l'AEARO-84 et l'AEARP-84, pour distinguer les effets respectifs d'une dépendance à l'écoulement commune et ceux spécifiques au modèle AROME. Les plus larges corrélations sont obtenues pour l'humidité spécifique, situées entre 0,4 et 0,7 environ. Il est fort probable que cela soit dû à la zone de fortes variances sur la Méditerranée, qui est représentée à la fois dans l'AEARP et dans l'AEARO (2.10). D'un autre côté, les corrélations de l'AEARP-84 sont plus faibles que celles de l'AEARO-06, montrant l'importance des structures de petite échelle spécifiques à AROME. Cet effet est plus prononcé pour la température, tandis que le cas du vent est intermédiaire. Ceci pourrait être dû aux structures de petite échelle des perturbations de température spécifiques à l'AEARO, liées par exemple à la convection.

L'augmentation de la corrélation au-dessus de 250 hPa peut être expliquée par la relaxation spectrale des champs AROME vers les coupleurs ARPEGE, qui augmente linéairement

dans la stratosphère. On note aussi que les corrélations entre les variances de l'AEARP et de l'AEARO sont beaucoup plus faibles pour la vorticité que pour le vent, ce qui reflète la forte dépendance de la vorticité à la résolution du modèle, comme on l'a mentionné précédemment. Enfin, les effets du sous-échantillonnage dégradent les corrélations d'environ 10% entre l'AEARP-84 et l'AEARP-06.

2.2.3. Diagnostic expérimental des tenseurs LCH

Les caractéristiques des tenseurs LCH ainsi que les difficultés liées à leur estimation sont abordées dans les annexes A.1.2 et A.1.3. On en rappelle ici les grandes lignes.

Estimation des tenseurs LCH

Le tenseur LCH $\boldsymbol{H}(\mathbf{r})$ est défini dans Weaver et Mirouze (2012) par :

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}'}^{\mathrm{T}} C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \tag{2.10}$$

où le vecteur $\mathbf{r}$ de taille d contient les coordonnées dans l'espace physique à d dimensions : $\mathbf{r} = (x_1, ..., x_d)^{\mathrm{T}}$, et où $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est une fonction de corrélation entre les lieux $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$, que l'on suppose deux fois dérivable. Ce tenseur fournit donc une indication sur la courbure de la fonction de corrélation C à son origine. La longueur de portée correspondant à ce tenseur peut être définie par :

$$\mathcal{L}^b = \det(\boldsymbol{H})^{-1/(2d)} \tag{2.11}$$

Dans le cas où la fonction de corrélation C est homogène et isotrope, on retrouve alors la longueur de portée définie par Daley (1991).

Dans un cadre continu, Belo Pereira et Berre (2006) montrent que les composantes du tenseur LCH peuvent être estimées à partir de l'erreur d'ébauche $\varepsilon^b(\mathbf{r})$ et de son écart-type $\sigma^b(\mathbf{r})$:

$$H_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \sigma^b(\mathbf{r})^{-2} \left(\mathbb{E}\left[\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta} \right] - \frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta} \right) \tag{2.12}$$

On montre dans l'annexe A.1.2 que cette formulation est théoriquement équivalente à celle de Michel (2012b) :

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{r}) = \mathrm{Cov}\left(\nabla\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})} \right) \right) \tag{2.13}$$

Une fois passées dans un cadre discret, et en utilisant un ensemble fini de perturbations pour échantillonner les tenseurs, ces formulations ne sont plus équivalentes. En notant $\widetilde{H}_{\alpha\beta|i}$ la composante d'indices (α, β) du tenseur LCH $\widetilde{\boldsymbol{H}}$ estimé au point d'indice i, on obtient respectivement pour les formulations 2.12 et 2.13 :

$$\widetilde{H}^{\mathrm{BPB}}_{\alpha\beta|i} = (\widetilde{\sigma}^b_i)^{-2} \Big(\mathrm{Cov}_N \left((\boldsymbol{D}_\alpha \widetilde{\mathbf{x}}^b)_i, (\boldsymbol{D}_\beta \widetilde{\mathbf{x}}^b)_i \right) - (\boldsymbol{D}_\alpha \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b)_i (\boldsymbol{D}_\beta \widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b)_i \Big) \tag{2.14a}$$

$$\widetilde{H}^{\mathrm{M}}_{\alpha\beta|i} = \mathrm{Cov}_N \left(\left(\boldsymbol{D}_\alpha \left(\frac{\widetilde{\mathbf{x}}^b}{\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b} \right) \right)_i, \left(\boldsymbol{D}_\beta \left(\frac{\widetilde{\mathbf{x}}^b}{\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b} \right)_i \right) \right) \tag{2.14b}$$

où $\boldsymbol{D}_\alpha$ désigne un opérateur de dérivation dans la direction α, Cov_N est un estimateur de la covariance à partir d'un échantillon de taille N et $\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b$ est le vecteur des écarts-types estimés.

La principale différence entre les méthodes d'estimation 2.14a et 2.14b vient du fait que, par construction, la seconde assure que le tenseur estimé est défini positif. À l'inverse, rien ne garantit que l'estimation 2.14a déduite de la formulation de Belo Pereira et Berre (2006) soit définie positive. Comme le montre la figure 2.14, cet écueil se produit d'autant plus fréquemment que :

— la taille de l'ensemble N est petite, et donc le bruit d'échantillonnage élevé,
— la variable considérée est de petite échelle, d'où des dérivées de grande amplitude (particulièrement pour la vorticité et la divergence non balancée).

Les résultats montrés dans la suite sont donc obtenus en utilisant la formulation de Michel (2012b).

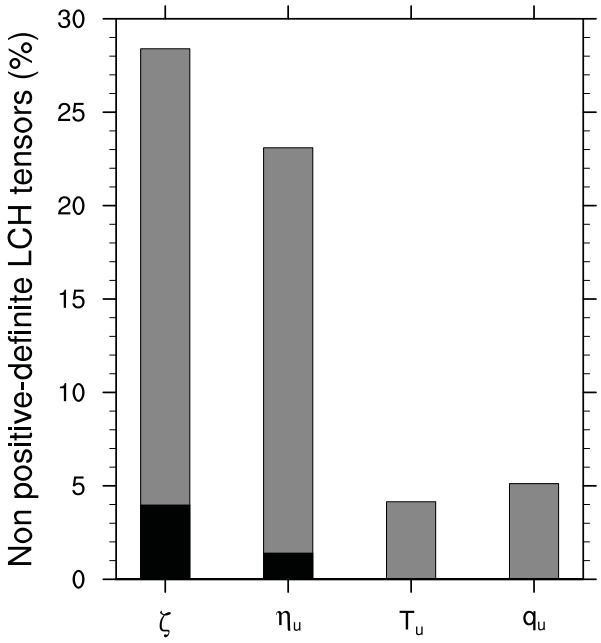


Figure 2.14. – Proportion de cas où les tenseurs estimés par l'équation 2.14a ne sont pas définis positifs, pour l'ensemble AEARO à 6 membres (gris) ou à 84 membres (noir), pour les champs suivants : vorticité, vent zonal, température et humidité spécifique.

Pertinence des tenseurs LCH

Comme l'implique sa définition, basée sur la courbure de la fonction de corrélation à l'origine, le tenseur LCH ne décrit pas les anisotropies qui affectent les corrélations à longue distance. Seules les hétérogénéités et les anisotropies de courte distance sont donc diagnostiquées par les tenseurs LCH. L'ellipse utilisée pour représenter un tenseur LCH, décrite dans l'annexe A.1.1, peut donc être interprétée comme une approximation de premier ordre de la forme de la fonction de corrélation autour de l'origine. La figure 2.15 montre une connexion forte entre la forme de l'ellipse et les isocontours de la fonction de corrélation entre 0,7 et 0,8, les tenseurs et les corrélations étant estimés par l'AEARO-84. Cependant, cette propriété est moins évidente dans les régions où la topographie varie rapidement (comme les Alpes sur la figure 2.15), où la fonction de corrélation horizontale à un niveau hybride donné semble très complexe, et n'est pas très bien décrite par un tenseur LCH.

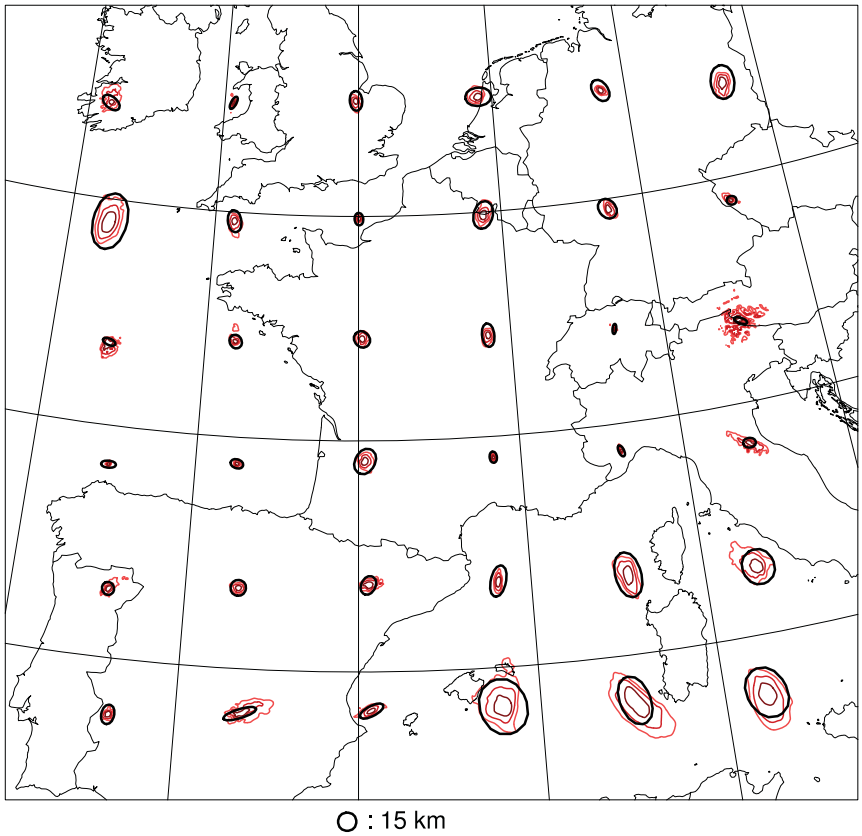


Figure 2.15. – Corrélation d'erreur d'ébauche pour l'humidité spécifique au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa) de l'AEARO-84. Les ellipses noires représentent les tenseurs LCH normalisés par un facteur constant, et les lignes fines donnent les isocontours 0,7, 0,8 et 0,9 de la corrélation locale.

Exemples de dépendance à l'écoulement

Les tenseurs LCH et les longueurs de portée correspondantes sont illustrés sur la figure 2.16, pour l'humidité spécifique au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa), i.e. pour la même variable que la figure 2.10. La carte en haut à gauche y montre l'estimation donnée par l'ensemble AEARO-84. On constate que les longueurs de portée sont relativement importantes sur la mer Méditerranée, comparées par exemple aux faibles valeurs sur des zones montagneuses, comme les Pyrénées, les Alpes et la Corse, ce qui est cohérent avec la figure 10 de Deckmyn et Berre (2005). Ceci reflète probablement la situation météorologique à grande échelle dans la zone méditerranéenne, puisque les fonctions de corrélation tendent à s'étirer dans la direction du flux méridien. De longues portées sont aussi observées près des bords du domaine, sous l'influence du modèle coupleur de grande échelle. Ces perturbations de grande échelle sont advectées par l'écoulement vers l'intérieur du domaine AROME près des bords ouest et sud, tandis que cet effet est beaucoup moins visible aux bords est et nord où le flux sort du domaine. On peut aussi noter que globalement les portées sont relativement courtes (respectivement longues) aux endroits où les variances sont fortes (respectivement faibles), comme le nord-ouest et le sud de la France. Ceci montre en particulier l'influence des structures convectives où les portées sont beaucoup plus courtes que dans l'air clair, confirmant ainsi les résultats de Montmerle et Berre (2010).

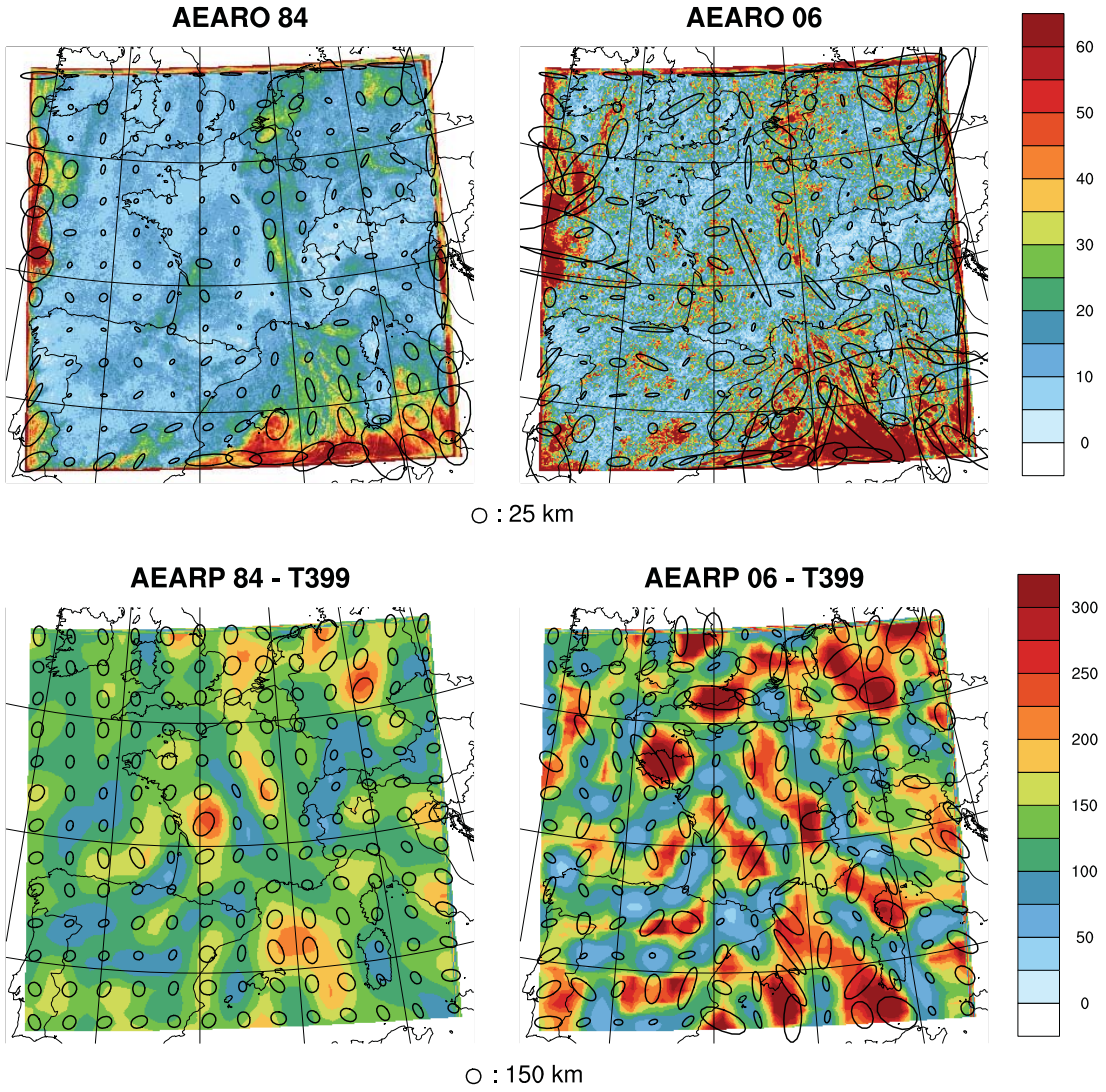


Figure 2.16. – Tenseurs LCH d'erreur d'ébauche pour l'humidité spécifique au niveau 50 d'AROME (en haut) et au niveau 62 d'ARPEGE (en bas), soit aux environs de 945 hPa, pour des ensembles de 84 membres (à gauche) ou de 6 membres (à droite). Les ellipses noires représentent les tenseurs LCH normalisés par un facteur constant, et la longueur de portée est donnée par l'échelle de couleur (unité : km).

Les mêmes diagnostics conduits pour l'AEARP-84 sont montrés en bas à gauche de la figure 2.16. Comme prévu, les longueurs de portée sont beaucoup plus grandes pour l'AEARP que pour l'AEARO. Cet aspect est discuté par exemple dans Daley (1991) et dans Berre (2000), où l'on montre que la longueur de portée $\mathcal{L}^b$, parfois appelée "microéchelle", est très sensible à la partie de petite échelle du spectre, qui dépend fondamentalement de la résolution (cf. figure 3 de Brousseau *et al.* (2011)). Pour cette raison, les longueurs de portée sont difficilement comparables entre l'AEARO et l'AEARP. Malgré cela, des zones de portées relativement longues sont communes aux configurations AEARO-84 et AEARP-84, sur la Méditerranée et de chaque côté de la bande nord-sud de faibles portées qui traverse la France. Les structures liées à la circulation de grande échelle sont donc en partie visibles sur les modèles globaux et régionaux, mais le modèle AROME génère des structures d'échelle plus fine, associées à des portées plus courtes, conformément à sa résolution et à son système d'assimilation (qui utilise en plus de données radar par exemple).

Bruit d'échantillonnage

La carte en haut à droite de la figure 2.16 montre les mêmes diagnostics pour l'AEARO-06. D'une part, certaines structures sont communes à celles de l'AEARO-84, comme les longues portées sur la Méditerranée et les courtes portées sur les reliefs. D'autre part, on constate que les maxima de portée de l'AEARO-06 sont très exagérés en amplitude, et sont moins structurés spatialement que ceux de l'AEARO-84, avec une prolifération de maxima locaux.

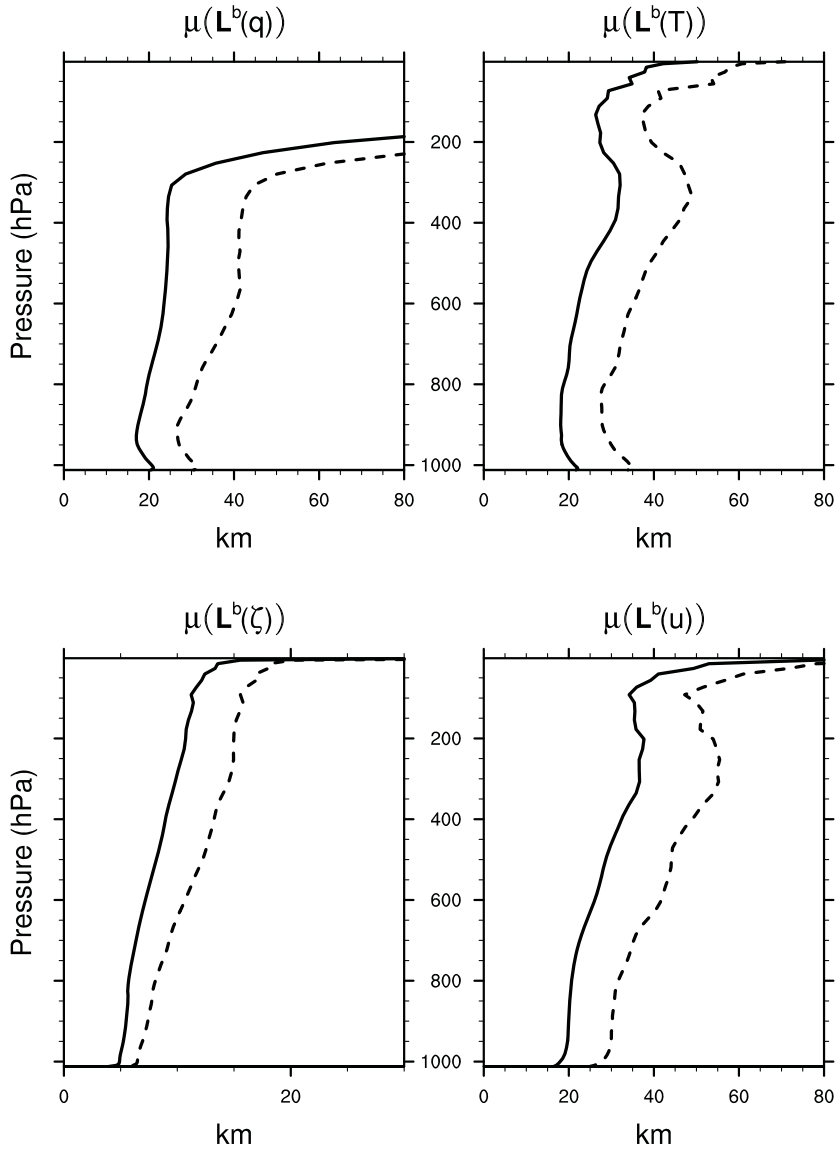


Figure 2.17. – Profils verticaux de longueur de portée d'erreur d'ébauche moyenne, pour l'AEARO-84 (trait plein) et l'AEARO-06 (tireté). L'humidité spécifique (q), la température (T), la vorticité (ζ) et le vent zonal (u) sont représentés.

Les profils verticaux de portées moyennes sont indiqués sur la figure 2.17, et montrent une surestimation systématique pour l'AEARO-06 par rapport à l'AEARO-84, de 25 à 50%. Ce biais est cohérent avec les résultats de Pannekoucke *et al.* (2008) sur l'estimation de portées à partir d'un ensemble de taille réduite. Les distributions de portée sont données par la figure 2.18, pour l'humidité spécifique au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa). Il apparaît par exemple que pour l'AEARO-06 (comparée à l'AEARO-84), la proportion de portées de 10 km correspondant au

pic de la distribution est sous-estimée d'un facteur 2, tandis que la proportion de portées de 30 km est surestimée d'un facteur 2, d'où le fort biais positif.

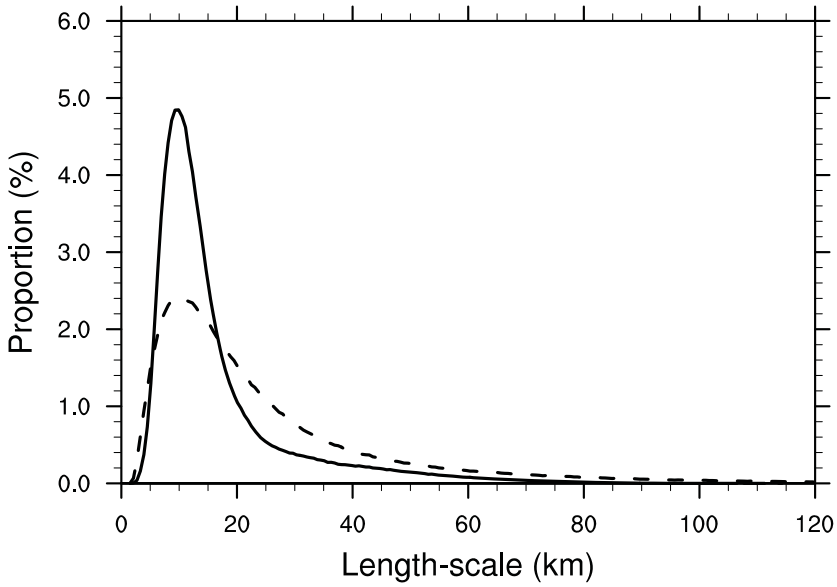


Figure 2.18. – Distributions de longueur de portée d'erreur d'ébauche pour l'humidité spécifique au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa) de l'AEARO-84 (trait plein) et de l'AEARO-06 (tireté).

Ces effets du bruit d'échantillonnage sont encore plus marqués en ce qui concerne l'anisotropie des tenseurs estimés par les configurations à 6 membres de l'AEARO et de l'AEARP. Cette anisotropie est illustrée à certains endroits de la figure 2.16 en dessinant les ellipses dont les axes et les orientations sont liés au tenseur LCH. Cela monte clairement que les anisotropies des ensembles à 6 membres sont exagérées par rapport à celles des ensembles à 84 membres.

Malgré ces limitations, les corrélations spatiales des portées, données par $\mathrm{cor}(\widetilde{\mathcal{L}}^b, \widetilde{\mathcal{L}}^{b,\mathrm{ref}})$ (pas d'illustration) sont presque toujours supérieures à 50% pour la vorticité, et à supérieures à 70% pour les autres variables, ce qui est relativement élevé. Ces résultats indiquent qu'une part d'information sur les corrélations locales peut être extraite de l'AEARO-06, avec éventuellement un filtrage spatial pour réduire le bruit d'échantillonnage.

3 | Théorie du filtrage linéaire optimal des covariances

Ce chapitre reprend en les complétant des éléments de l'article Ménétrier, Montmerle, Michel et Berre (2014b), soumis à la revue Monthly Weather Review. Après une description détaillée des théories de l'estimation des moments centrés et du filtrage linéaire optimal, on établit le cœur théorique de cette thèse : l'équivalence entre la définition d'un filtre linéaire optimal pour les covariances échantillonnées et la vérification de critères d'optimalité basés sur les moments d'ordre deux et quatre bruts et les covariances filtrées.

Sommaire

3.1	**Estimation de moments centrés : théorie et pratique**	**57**
3.1.1	Erreur d'échantillonnage	57
3.1.2	Covariance échantillonnée d'une distribution gaussienne	58
3.1.3	Moments centrés échantillonnés à partir d'une distribution quelconque	60
3.1.4	Algorithme d'estimation itérative des moments centrés	61
3.2	**Théorie du filtrage linéaire optimal**	**62**
3.2.1	Formalisme du problème	63
3.2.2	Propriétés principales	64
3.2.3	Analogie avec l'assimilation de données	65
3.2.4	Cas du filtrage de Schur	66
3.3	**Critères de filtrage linéaire optimal des covariances**	**67**
3.3.1	Moments asymptotiques aléatoires	67
3.3.2	Équivalence du filtrage optimal et du critère d'optimalité	69
3.3.3	Cas du filtrage de Schur	70

3.1. Estimation de moments centrés : théorie et pratique

Dans cette section, on détaille comment les moments centrés d'ordre deux et quatre d'un vecteur aléatoire peuvent être échantillonnés à partir d'ensembles, et comment les statistiques de ces estimations peuvent être calculées.

3.1.1. Erreur d'échantillonnage

Soit $\mathbf{x}^b$ un vecteur aléatoire de taille n et $\boldsymbol{\varepsilon}^b$ son écart à son espérance :

$$\boldsymbol{\varepsilon}^b = \mathbf{x}^b - \mathbb{E}[\mathbf{x}^b] \tag{3.1}$$

Dans le contexte de l'assimilation de données, tel que rappelé au chapitre 1, il s'agirait de l'ébauche et de l'erreur d'ébauche, en supposant que celle-ci soit sans biais. Cependant, la totalité de ce chapitre est applicable dans n'importe quel autre contexte. Les éléments des matrices $\mathbf{B}$ et $\boldsymbol{\Xi}$, correspondants aux moments centrés d'ordre deux et quatre de la distribution

de $\mathbf{x}^b$, sont respectivement donnés par :

$$B_{ij} = \mathbb{E}\big[\varepsilon^b_i \varepsilon^b_j\big] \tag{3.2a}$$

$$\Xi_{ijkl} = \mathbb{E}\big[\varepsilon^b_i \varepsilon^b_j \varepsilon^b_k \varepsilon^b_l\big] \tag{3.2b}$$

On suppose disposer d'un échantillon de N ébauches, notées $\{\widetilde{\mathbf{x}}^b_p\}_{1\leq p\leq N}$, les perturbations correspondantes étant simplement données par :

$$\delta\widetilde{\mathbf{x}}^b = \widetilde{\mathbf{x}}^b_p - \langle\widetilde{\mathbf{x}}^b\rangle \tag{3.3}$$

où les chevrons désignent la moyenne d'ensemble :

$$\langle\widetilde{\mathbf{x}}^b\rangle = \frac{1}{N}\sum_{p=1}^{N}\widetilde{\mathbf{x}}^b_p \tag{3.4}$$

Il est possible d'estimer les moments centrés 3.2a et 3.2b à partir de ces perturbations :

$$\widetilde{B}_{ij} = \frac{1}{N-1}\sum_{p=1}^{N}\delta\widetilde{x}^b_{i,p}\delta\widetilde{x}^b_{j,p} \tag{3.5a}$$

$$\widetilde{\Xi}_{ijkl} = \frac{1}{N}\sum_{p=1}^{N}\delta\widetilde{x}^b_{i,p}\delta\widetilde{x}^b_{j,p}\delta\widetilde{x}^b_{k,p}\delta\widetilde{x}^b_{l,p} \tag{3.5b}$$

où les indices i, j, k et l font référence à un élément d'un vecteur, et l'indice p à un membre de l'ensemble. Cette estimation de $\widetilde{\Xi}_{ijkl}$ est biaisée, ce biais étant quantifié à la fin de la section 3.1.3.

Les valeurs asymptotiques de la matrice de covariance $\widetilde{\mathbf{B}}$ et du moment d'ordre quatre $\widetilde{\mathbf{\Xi}}$ pour un échantillon de taille infinie sont notées $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}^\star$:

$$\widetilde{\mathbf{B}}^\star = \lim_{N\to\infty}\widetilde{\mathbf{B}} \tag{3.6a}$$

$$\widetilde{\mathbf{\Xi}}^\star = \lim_{N\to\infty}\widetilde{\mathbf{\Xi}} \tag{3.6b}$$

Comme on l'a montré au chapitre 1, la dynamique de $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$ dans un système d'assimilation d'ensemble suit celle de la vraie matrice de covariance $\mathbf{B}$. Cependant, si les covariances des perturbations explicites sont mal spécifiées pendant la génération de l'ensemble, il est possible que les valeurs asymptotiques $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}^\star$ ne convergent pas vers les vraies valeurs $\mathbf{B}$ et $\mathbf{\Xi}$. Dans la suite de cette partie, on ne traitera pas des erreurs systématiques $\widetilde{\mathbf{B}}^\star - \mathbf{B}$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}^\star - \mathbf{\Xi}$, mais on se concentrera uniquement sur les erreurs d'échantillonnage $\widetilde{\mathbf{B}} - \widetilde{\mathbf{B}}^\star$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}} - \widetilde{\mathbf{\Xi}}^\star$ induites par la taille limitée de l'échantillon.

3.1.2. Covariance échantillonnée d'une distribution gaussienne

Théorie de Wishart

Les éléments de la théorie de Wishart (1928) résumés dans cette section sont repris de la synthèse détaillée fournie par Muirhead (2005).

On suppose que les éléments de l'échantillon suivent une distribution gaussienne :

$$\widetilde{\mathbf{x}}^b \sim \mathcal{N}_n(\mathbf{x}^t, \widetilde{\mathbf{B}}^\star) \tag{3.7}$$

Muirhead (2005) rappelle que la moyenne d'ensemble a une distribution gaussienne de même espérance et de matrice de covariance $\widetilde{\mathbf{B}}^\star/N$:

$$\langle\widetilde{\mathbf{x}}^b\rangle \sim \mathcal{N}_n(\mathbf{x}^t, \widetilde{\mathbf{B}}^\star/N) \tag{3.8}$$

Il montre également que la matrice $\mathbf{S}$ définie par :

$$\mathbf{S} = \sum_{p=1}^{N} (\widetilde{\mathbf{x}}_p^b - \langle\widetilde{\mathbf{x}}^b\rangle)(\widetilde{\mathbf{x}}_p^b - \langle\widetilde{\mathbf{x}}^b\rangle)^{\mathrm{T}} \tag{3.9}$$

suit une distribution de Wishart (Wishart, 1928) avec $N-1$ degrés de liberté et une matrice de covariance $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$. Cette distribution est notée $\mathcal{W}_n(N-1, \widetilde{\mathbf{B}}^\star)$.

Dykstra (1970) montre que $\mathbf{S}$ est définie positive avec une probabilité 1 si et seulement si $N-1 \geq n$ où n est la taille du vecteur $\widetilde{\mathbf{x}}^b$. Pour des systèmes de grande taille, cette condition n'est généralement pas vérifiée, et la matrice $\mathbf{S}$ est singulière. Dans ce cas, la distribution $\mathcal{W}_n(N-1, \widetilde{\mathbf{B}}^\star)$ ne possède pas d'expression explicite, mais sa fonction caractéristique existe, et est définie par :

$$\Phi_{\mathbf{S}}(\mathbf{\Theta}) = \mathbb{E}\Big[\exp\left(\imath \mathrm{tr}(\mathbf{\Theta}^{\mathrm{T}}\mathbf{S})\right)\Big] \tag{3.10}$$

où $\imath$ désigne le nombre imaginaire : $\imath^2 = -1$. Muirhead (2005) rappelle que cette fonction caractéristique peut se mettre sous la forme :

$$\Phi_{\mathbf{S}}(\mathbf{\Theta}) = \det\left(\mathbf{I} - \imath\mathbf{\Gamma}\widetilde{\mathbf{B}}^\star\right)^{-(N-1)/2} \tag{3.11}$$

où pour $(i,j) \in [1,n]^2$, $\Gamma_{ij} = (1+\delta_{ij})\Theta_{ij}$, avec $\Theta_{ji} = \Theta_{ij}$ et δ_{ij} le symbole de Kronecker. La fonction génératrice des moments de la distribution est alors déduite de la fonction caractéristique :

$$\begin{aligned}\mathcal{M}_{\mathbf{S}}(\mathbf{\Theta}) &= \Phi_{\mathbf{S}}(-\imath\mathbf{\Theta}) \\ &= \det\left(\mathbf{I} - \mathbf{\Gamma}\widetilde{\mathbf{B}}^\star\right)^{-(N-1)/2}\end{aligned} \tag{3.12}$$

En notant $\mathbf{k}$ une matrice d'entiers naturels de taille $n \times n$, le moment $m_{\mathbf{S},\mathbf{k}}$ d'ordre total $k_{\mathrm{tot}} = \sum k_{ij}$ est défini par :

$$m_{\mathbf{S},\mathbf{k}} = \mathbb{E}\left[\prod_{1\leq i,j\leq n} S_{ij}^{k_{ij}}\right] \tag{3.13}$$

Ce moment peut être calculé par dérivation de $\mathcal{M}_{\mathbf{S}}(\mathbf{\Theta})$:

$$m_{\mathbf{S},\mathbf{k}} = \left.\frac{\partial^{k_{\mathrm{tot}}}\mathcal{M}_{\mathbf{S}}}{\prod_{ij}\partial\Theta_{ij}^{k_{ij}}}\right|_{\mathbf{\Theta}=0} \tag{3.14}$$

La méthode de dérivation des moments à partir de l'équation 3.14 est détaillée dans l'annexe A.2.1.

Espérance et covariance de $\widetilde{\mathrm{B}}$

L'espérance d'un élément de la matrice $\mathbf{S}$ définie à l'équation 3.9 est ainsi donnée par :

$$\mathbb{E}[S_{ij}] = \left.\frac{\partial \mathcal{M}_{\mathbf{S}}}{\partial \Theta_{ij}}\right|_{\mathbf{\Theta}=0} \tag{3.15}$$

soit après calcul et simplification :

$$\mathbb{E}[\mathbf{S}] = (N-1)\widetilde{\mathbf{B}}^{\star} \tag{3.16}$$

ce qui prouve que l'estimateur 3.5a est sans biais :

$$\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{B}}] = \widetilde{\mathbf{B}}^{\star} \tag{3.17}$$

Par la même méthode, la covariance de deux éléments de $\mathbf{S}$ est donné par :

$$\mathbb{E}[S_{ij}S_{kl}] = \left.\frac{\partial^2 \mathcal{M}_{\mathbf{S}}}{\partial \Theta_{ij}\partial \Theta_{kl}}\right|_{\mathbf{\Theta}=0} \tag{3.18}$$

soit après calcul et simplification :

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}\,(S_{ij}, S_{kl}) &= \mathbb{E}[S_{ij}S_{kl}] - \mathbb{E}[S_{ij}]\mathbb{E}[S_{kl}] \\ &= (N-1)(\widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl} + \widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk})\end{aligned} \tag{3.19}$$

Ainsi, la covariance de $\widetilde{B}_{ij}$ et $\widetilde{B}_{kl}$ est donné par :

$$\mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}_{ij}, \widetilde{B}_{kl}) = \frac{1}{N-1}(\widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl} + \widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk}) \tag{3.20}$$

Si on considère la covariance de variances seulement, on trouve à partir de l'équation 3.20 que :

$$\mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}_{ii}, \widetilde{B}_{jj}) = \frac{2}{N-1}(\widetilde{B}^{\star}_{ij})^2 \tag{3.21}$$

Ce dernier résultat peut être prouvé par un calcul direct, comme l'ont fait Raynaud *et al.* (2009).

3.1.3. Moments centrés échantillonnés à partir d'une distribution quelconque

Il est possible de calculer l'espérance et les covariances de la distribution de $\widetilde{\mathbf{B}}$ sans hypothèse sur la distribution de $\widetilde{\mathbf{x}}^b$.

Nouvel estimateur de $\widetilde{\mathrm{B}}$

On montre dans l'annexe A.2.2 que l'estimateur :

$$\widetilde{B}_{ij} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{1 \le p < q \le N} (\widetilde{x}^b_{i,p} - \widetilde{x}^b_{i,q})(\widetilde{x}^b_{j,p} - \widetilde{x}^b_{j,q}) \tag{3.22}$$

est parfaitement égal à celui de l'équation 3.5a.

Espérance et covariance de $\widetilde{\mathbf{B}}$

Dans l'annexe A.2.3, on montre grâce au nouvel estimateur 3.22 et connaissant les propriétés A.38b et A.38d des perturbations que l'espérance de la covariance échantillonnée est égale à la covariance asymptotique :

$$\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}] = \widetilde{B}^{\star}_{ij} \tag{3.23}$$

D'un point de vue expérimental, l'équation 3.23 correspond à un fait simple : si un ensemble de taille $N \times N'$ est séparé en N' sous-ensembles distincts de taille N, et si des estimations de $\widetilde{\mathbf{B}}$ sont calculées pour chaque sous-ensemble, alors la moyenne des $\widetilde{\mathbf{B}}$ sur tous les sous-ensembles converge vers $\widetilde{\mathbf{B}}^{\star}$ quand N' tend vers l'infini.

On montre également dans l'annexe A.2.3 que la covariance de deux éléments de $\widetilde{\mathbf{B}}$ est donnée par :

$$\mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}_{ij}, \widetilde{B}_{kl}) = \frac{1}{N}\widetilde{\Xi}^{\star}_{ijkl} - \frac{1}{N}\widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl} + \frac{1}{N(N-1)}\left(\widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl} + \widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk}\right) \tag{3.24}$$

Dans le cas où la distribution de l'ensemble est gaussienne, le théorème de Wick-Isserlis permet d'exprimer les moments d'ordre supérieur grâce aux covariances (Isserlis, 1916, 1918). Ainsi, on obtient en particulier pour le moment d'ordre quatre :

$$\widetilde{\Xi}^{\star}_{ijkl} = \widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl} + \widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl} + \widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk} \tag{3.25}$$

Ceci permet de retrouver le résultat 3.20 de la théorie de Wishart à partir de l'équation 3.24.

Espérance de $\widetilde{\Xi}$

Le moment centré d'ordre quatre échantillonné $\widetilde{\boldsymbol{\Xi}}$ donné par l'équation 3.5b est biaisé, et ce biais dépend à la fois du moment centré d'ordre quatre asymptotique et des covariances asymptotiques. Dans l'annexe A.2.4, on montre que l'espérance de $\widetilde{\Xi}_{ijkl}$ vaut :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijkl}] = {} & \frac{(N-1)(N^2-3N+3)}{N^3}\widetilde{\Xi}^{\star}_{ijkl} \\ & + \frac{(N-1)(2N-3)}{N^3}(\widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl} + \widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl} + \widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk})\end{aligned} \tag{3.26}$$

Dans le cas où la distribution de l'ensemble est gaussienne, le théorème de Wick-Isserlis permet d'obtenir :

$$\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijkl}] = \frac{(N-1)^2}{N^2}(\widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl} + \widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl} + \widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk}) \tag{3.27}$$

3.1.4. Algorithme d'estimation itérative des moments centrés

Pour calculer les moments centrés, les algorithmes usuels procèdent en deux étapes : calcul de la moyenne, puis calcul des moments centrés. L'intérêt de l'algorithme d'estimation itérative est de pouvoir arriver au même résultat en une seule étape. Ainsi, il n'est pas nécessaire de stocker toutes les membres de l'ensemble en mémoire ou de les charger deux fois, mais seulement de les charger une fois, un par un. Des formules permettent d'obtenir les statistiques voulues de manière exacte, la différence des résultats à une précision donnée n'étant due qu'au changement de l'ordre des opérations (Welford, 1962). Knuth (1997) a même montré que l'estimation itérative des covariances était robuste et possédait une meilleure précision que les autres méthodes usuelles.

Dans l'annexe A.2.5, on montre que la moyenne calculée à partir de $N-1$ membres peut être mise à jour lors du chargement d'un $N^{\text{ème}}$ membre par :

$$\langle \widetilde{x}_i^b \rangle_N = \langle \widetilde{x}_i^b \rangle_{N-1} + \frac{1}{N}(\widetilde{x}_{i,N}^b - \langle \widetilde{x}_i^b \rangle_{N-1}) \tag{3.28}$$

où l'indice appliqué aux chevrons désigne la taille de l'ensemble sur lequel la moyenne est calculée.

On note cette fois $\mathbf{k}$ un vecteur d'entier naturels de taille n. Le moment centré $m'_{\mathbf{k}}$ d'ordre total $k_{\text{tot}} = \sum k_i$ est défini par :

$$m'_{\mathbf{k}} = \mathbb{E}\left[\prod_{i=1}^{n} (x_i - \mathbb{E}[x_i])^{k_i}\right] \tag{3.29}$$

Il peut être estimé à un facteur près par la somme :

$$s_{\mathbf{k},N} = \sum_{p=1}^{N} \prod_{i=1}^{n} (\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle \widetilde{x}_i^b \rangle_N)^{k_i} \tag{3.30}$$

Or cette somme peut elle aussi être estimée itérativement, comme le montre l'annexe A.2.5 :

$$\begin{aligned} s_{\mathbf{k},N} = &\sum_{m_1=0}^{k_1} \cdots \sum_{m_n=0}^{k_n} \left(\frac{-1}{N}\right)^{\sum_{i=1}^{n}(k_i-m_i)} \prod_{i=1}^{n} \left(\binom{k_i}{m_i} (\widetilde{x}_{i,N}^b - \langle \widetilde{x}_i^b \rangle_{N-1})^{k_i-m_i} \right) s_{\mathbf{m},N-1} \\ &+ \left(\frac{N-1}{N}\right)^{\sum_{i=1}^{n} k_i} \prod_{i=1}^{n} (\widetilde{x}_{i,N}^b - \langle \widetilde{x}_i^b \rangle_{N-1})^{k_i} \end{aligned} \tag{3.31}$$

Ainsi, la somme $s_{\mathbf{k},N-1}$ calculée à partir de $N-1$ membres peut être mise à jour par le nouveau membre de chaque variable $\widetilde{x}_{i,N}^b$ en stockant en plus :

- les sommes $s_{\mathbf{m},N-1}$ d'ordre total $\sum m_i < \sum k_i$,
- les moyennes $\langle \widetilde{x}_i^b \rangle_{N-1}$,

Si les sommes $s_{\mathbf{k},N}$ sont écrasées à chaque itération, il est nécessaire de faire les mises à jour par ordres totaux $\sum k_i$ décroissants, puis de finir par les moyennes $\langle \widetilde{x}_i^b \rangle_N$.

Pour les moments $\widetilde{\mathbf{B}}$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}$ qui nous intéressent, l'algorithme de calcul itératif est détaillé dans l'annexe A.2.6.

3.2. Théorie du filtrage linéaire optimal

Une seconde théorie est essentielle pour comprendre les critères exposés dans la section suivante : la théorie du filtrage linéaire optimal. Après la dérivation des conditions d'optimalité, de nombreuses propriétés sont détaillées, ainsi qu'une analogie avec l'assimilation de données. Enfin, le filtrage de Schur est abordé, comme cas particulier du filtrage linéaire.

3.2.1. Formalisme du problème

Filtrage linéaire optimal

Dans la théorie du filtrage linéaire optimal, la "vérité" $\widetilde{\mathbf{x}}^\star$ est considérée comme un vecteur aléatoire de taille n, dont on ne possède qu'une estimation bruitée $\widetilde{\mathbf{x}}$. On définit l'estimation filtrée $\widehat{\mathbf{x}}$, filtrée linéairement, par :

$$\widehat{\mathbf{x}} = \mathbf{F}\widetilde{\mathbf{x}} + \mathbf{f} \tag{3.32}$$

où $\mathbf{F}$ est une matrice de taille $n \times n$ appelée "gain du filtre" et $\mathbf{f}$ un vecteur de taille n appelé "offset". L'erreur sur l'estimation filtrée $\widehat{\mathbf{x}}^e$ est définie par :

$$\widehat{\mathbf{x}}^e = \widehat{\mathbf{x}} - \widetilde{\mathbf{x}}^\star \tag{3.33}$$

Le gain du filtre et l'offset sont choisis pour minimiser l'espérance du carré de la norme euclidienne de l'erreur de filtrage :

$$e = \mathbb{E}\big[\|\widehat{\mathbf{x}}^e\|^2\big] \tag{3.34}$$

Le minimum de e est atteint si :

$$\frac{\partial e}{\partial f_k} = \mathbb{E}\Big[2\Big((\sum_{j=1}^{n} F_{kj}\widetilde{x}_j + f_k) - \widetilde{x}_k^\star\Big) \times (-1)\Big] = 0 \tag{3.35a}$$

$$\frac{\partial e}{\partial F_{kl}} = \mathbb{E}\Big[2\Big((\sum_{j=1}^{n} F_{kj}\widetilde{x}_j + f_k) - \widetilde{x}_k^\star\Big)\widetilde{x}_l\Big] = 0 \tag{3.35b}$$

ce qui équivaut aux conditions d'absence de biais pour $\widehat{\mathbf{x}}^e$ et d'orthogonalité généralisée entre $\widehat{\mathbf{x}}^e$ et $\widetilde{\mathbf{x}}$:

$$\mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{x}}^e\big] = 0 \tag{3.36a}$$

$$\mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{x}}^e\ \widetilde{\mathbf{x}}^{\mathrm{T}}\big] = 0 \tag{3.36b}$$

Ces deux conditions impliquent évidemment que $\widehat{\mathbf{x}}^e$ et $\widetilde{\mathbf{x}}$ sont décorrélés. Elles se transforment aisément en :

$$\mathbf{F} = \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star, \widetilde{\mathbf{x}}\right) \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}\right)^{-1} \tag{3.37a}$$

$$\mathbf{f} = \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^\star\big] - \mathbf{F}\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}\big] \tag{3.37b}$$

Hypothèses sur l'erreur d'échantillonnage

On définit l'erreur d'échantillonnage $\widetilde{\mathbf{x}}^e$ par :

$$\widetilde{\mathbf{x}}^e = \widetilde{\mathbf{x}} - \widetilde{\mathbf{x}}^\star \tag{3.38}$$

Dans la suite, on fait l'hypothèse que cette erreur est sans biais :

$$\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^e\big] = 0 \tag{3.39}$$

d'où :

$$\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}\big] = \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^\star\big] \tag{3.40}$$

De plus, on suppose que cette erreur est orthogonale à la vérité :

$$\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^e\widetilde{\mathbf{x}}^{\star\mathrm{T}}\big] = 0 \tag{3.41}$$

ce qui implique la décorrélation de $\widetilde{\mathbf{x}}^\star$ et $\widetilde{\mathbf{x}}^e$:

$$\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star, \widetilde{\mathbf{x}}^e\right) = \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^\star \widetilde{\mathbf{x}}^{e\mathrm{T}}\big] - \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^\star\big]\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^{e\mathrm{T}}\big] = 0 \tag{3.42}$$

d'où :

$$\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star, \widetilde{\mathbf{x}}\right) = \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star\right) \tag{3.43}$$

$$\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}\right) = \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star\right) + \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^e\right) \tag{3.44}$$

où $\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star\right)$ désigne l'autocovariance de $\widetilde{\mathbf{x}}^\star$.

Le filtre linéaire optimal peut ainsi se mettre sous la forme :

$$\mathbf{F} = \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star\right)\Big(\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star\right) + \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^e\right)\Big)^{-1} \tag{3.45a}$$

$$\mathbf{f} = (\mathbf{I} - \mathbf{F})\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^\star\big] \tag{3.45b}$$

3.2.2. Propriétés principales

Changement de base du filtre optimal

On définit la matrice inversible $\mathbf{P}$ qui permet de passer de la base $\mathcal{B}_{\mathbf{x}}$ à la base $\mathcal{B}_{\mathbf{s}}$. En supposant que les filtres $(\mathbf{F}_{\mathbf{x}}, \mathbf{f}_{\mathbf{x}})$ et $(\mathbf{F}_{\mathbf{s}}, \mathbf{f}_{\mathbf{s}})$ soient optimaux dans les bases $\mathcal{B}_{\mathbf{x}}$ et $\mathcal{B}_{\mathbf{s}}$ respectivement, alors on montre dans l'annexe A.3.1 que ces filtres sont liés par la relation :

$$\mathbf{F}_{\mathbf{s}} = \mathbf{P}\mathbf{F}_{\mathbf{x}}\mathbf{P}^{-1} \tag{3.46a}$$

$$\mathbf{f}_{\mathbf{s}} = \mathbf{P}\mathbf{f}_{\mathbf{x}} \tag{3.46b}$$

Diagonalisation du gain du filtre optimal

Dans l'annexe A.3.2, on montre que le gain du filtre $\mathbf{F}$ est toujours diagonalisable, et que ses valeurs propres sont toujours strictement comprises entre 0 et 1.

Cette méthode montre aussi que la matrice $\mathbf{P}$ des vecteurs propres de $\mathbf{F}$ n'est pas orthogonale en général :

$$\mathbf{P}\mathbf{P}^{\mathrm{T}} \neq \mathbf{I} \tag{3.47}$$

La diagonalisation du gain du filtre dans une base orthogonale n'est donc pas toujours possible, car cela requiert que celui-ci soit symétrique défini positif, ce qui n'est pas toujours le cas. En effet, $\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star\right)$ et $\big(\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star\right) + \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^e\right)\big)^{-1}$ sont symétriques définies positives, mais l'ensemble des matrices symétriques définies positives n'est pas un groupe : le produit de deux de ses éléments n'est pas nécessairement dans l'ensemble. Un contre-exemple simple est donné par :

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \mathbf{AB} = \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 3 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{n'est pas symétrique}$$

Covariance de l'erreur de filtrage optimal

Comme le filtre est linéaire, l'orthogonalité de l'estimation bruitée et de l'erreur de filtrage (équation 3.36b) se transmet à l'estimation filtrée :

$$\mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{x}}^e \widehat{\mathbf{x}}^{\mathrm{T}}\big] = 0 \tag{3.48}$$

Ainsi :

$$\mathrm{Cov}\left(\widehat{\mathbf{x}}^e, \widehat{\mathbf{x}}\right) = \mathrm{Cov}\left(\widehat{\mathbf{x}}\right) - \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star, \widehat{\mathbf{x}}\right) = 0 \tag{3.49}$$

ce qui permet d'exprimer la covariance de l'erreur de filtrage par :

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}\left(\widehat{\mathbf{x}}^e\right) &= \mathrm{Cov}\left(\widehat{\mathbf{x}}\right) + \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star\right) - 2\,\mathrm{Cov}\left(\widehat{\mathbf{x}}, \widetilde{\mathbf{x}}^\star\right) \\ &= \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^\star\right) - \mathrm{Cov}\left(\widehat{\mathbf{x}}\right)\end{aligned} \tag{3.50}$$

Espérance du produit d'éléments de la vérité

En utilisant successivement les propriétés d'orthogonalité 3.41 et 3.36b, l'espérance du produit d'éléments de la vérité peut être exprimée comme l'espérance du produit d'éléments de l'estimation bruitée et de l'estimation filtrée :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^\star\widetilde{\mathbf{x}}^{\star\mathrm{T}}\big] &= \mathbb{E}\big[(\widetilde{\mathbf{x}}^\star + \widetilde{\mathbf{x}}^e)\widetilde{\mathbf{x}}^{\star\mathrm{T}}\big] \\ &= \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}\widetilde{\mathbf{x}}^{\star\mathrm{T}}\big] \\ &= \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}\big(\widetilde{\mathbf{x}}^\star + \widehat{\mathbf{x}}^e\big)^{\mathrm{T}}\big] \\ &= \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}\widehat{\mathbf{x}}^{\mathrm{T}}\big]\end{aligned} \tag{3.51}$$

Cette relation est importante pour la suite du développement, dans le sens où elle permet de calculer des statistiques impliquant $\widetilde{\mathbf{x}}^\star$, qui est fondamentalement inconnu, grâce à $\widetilde{\mathbf{x}}$ qui est connu (entrée du filtre) et à $\widehat{\mathbf{x}}$ qui est inconnu (l'optimalité n'est pas accessible en pratique) mais peut être approché.

3.2.3. Analogie avec l'assimilation de données

Analogie avec le BLUE

Par analogie avec l'équation 1.10, on peut exprimer le filtrage linéaire optimal sous la forme :

$$\widehat{\mathbf{x}} = \widetilde{\mathbf{x}} + (\mathbf{I} - \mathbf{F})\big(\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^\star\big] - \widetilde{\mathbf{x}}\big) \tag{3.52}$$

En suivant le formalisme général du BLUE de Talagrand (1999), on constate que le vecteur $\mathbf{z}$, décrivant les informations apportées au système, contient dans le cas du filtrage linéaire optimal :

- l'estimation bruitée $\widetilde{\mathbf{x}}$,
- l'espérance de la vérité $\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^\star\big]$, égale à celle de l'estimation bruitée $\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}\big]$ dans l'hypothèse d'un bruit non biaisé (équation 3.40).

Les équivalences entre les grandeurs présentes dans le BLUE et dans le filtrage linéaire optimal sont résumées dans le tableau 3.1.

Formalisme bayésien

Il est possible d'obtenir les équations du filtrage optimal en se basant sur une approche bayésienne, comme dans la section 1.2.1. La différence principale réside dans la nature différente des sources d'information. Dans le cas du filtrage optimal, l'ébauche est remplacée par l'estimation bruitée $\widetilde{\mathbf{x}}$, et les observations par l'espérance de la vérité $\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^\star\big]$, égale à celle de l'estimation bruitée $\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}\big]$ dans l'hypothèse d'un bruit non biaisé et supposée connue. D'après la loi de Bayes, la probabilité d'un vecteur $\mathbf{x}$ une fois que l'espérance de la vérité a été prise en compte est donnée par :

$$\mathbb{P}(\mathbf{x}|\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star]) = \frac{\mathbb{P}(\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star]|\mathbf{x})}{\mathbb{P}(\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star])}\mathbb{P}(\mathbf{x}) \tag{3.53}$$

Dans l'hypothèse où les distributions $\mathbb{P}(\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star]|\mathbf{x})$ et $\mathbb{P}(\mathbf{x})$ sont gaussiennes :

$$\mathbb{P}(\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star]|\mathbf{x}) \propto \exp\left(\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star])^{\mathrm{T}}\,\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^\star)^{-1}(\mathbf{x}-\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star])\right) \tag{3.54a}$$

$$\mathbb{P}(\mathbf{x}) \propto \exp\left(\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\widetilde{\mathbf{x}})^{\mathrm{T}}\,\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)^{-1}(\mathbf{x}-\widetilde{\mathbf{x}})\right) \tag{3.54b}$$

alors maximiser la probabilité $\mathbb{P}(\mathbf{x}|\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star])$ pour obtenir l'estimation filtrée $\widehat{\mathbf{x}}$ revient à minimiser la fonction coût $J(\mathbf{x})$:

$$J(\mathbf{x}) = J_{\,e}(\mathbf{x}) + J_{\,v}(\mathbf{x}) \tag{3.55}$$

avec :

$$J_{\,e}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star])^{\mathrm{T}}\,\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^\star)^{-1}(\mathbf{x}-\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star]) \tag{3.56a}$$

$$J_{\,v}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\widetilde{\mathbf{x}})^{\mathrm{T}}\,\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)^{-1}(\mathbf{x}-\widetilde{\mathbf{x}}) \tag{3.56b}$$

Cependant, cette méthode variationnelle de filtrage n'a pas été poursuivie, car elle se heurte à l'estimation et à l'inversion de $\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)$ et $\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^\star)$, que l'on cherche à éviter dans la suite.

Assimilation de données		Filtrage linéaire optimal	
Analyse	$\mathbf{x}^a$	$\widehat{\mathbf{x}}$	Estimation filtrée
Ebauche	$\mathbf{x}^b$	$\widetilde{\mathbf{x}}$	Estimation bruitée
Vérité	$\mathbf{x}^t$	$\widetilde{\mathbf{x}}^\star$	Vérité
Observations	$\mathbf{y}^o$	$\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star]$	Espérance de la vérité
Innovation	$\mathbf{d}$	$\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^\star]-\widetilde{\mathbf{x}}$	Plage de filtrage
Opérateur d'observation	$\mathbf{H}$	$\mathbf{I}$	Identité
Gain	$\mathbf{K}$	$\mathbf{I}-\mathbf{F}$	Identité - Gain du filtre
$\mathbf{K}=\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}+\mathbf{R})^{-1}$		$\mathbf{I}-\mathbf{F}=\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)\big(\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)+\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^\star)\big)^{-1}$	
Cov. d'err. d'ébauche	$\mathbf{B}$	$\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)$	Cov. d'err. d'échantillonnage
Cov. d'err. d'observation	$\mathbf{R}$	$\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^\star)$	Cov. de la vérité
Cov. d'err. d'analyse	$\mathbf{A}$	$\mathrm{Cov}\,(\widehat{\mathbf{x}}^e)$	Cov. d'err. de filtrage
Valeurs propres de $\mathbf{HK}$ et $\mathbf{KH}$ strictement comprises entre 0 et 1		Valeurs propres de $\mathbf{F}$ strictement comprises entre 0 et 1	

Table 3.1. – Analogie entre les formalismes de l'assimilation de donnée et du filtrage linéaire optimal.

3.2.4. Cas du filtrage de Schur

Le filtrage par un produit de Schur (produit élément par élément, noté $\circ$) équivaut à un filtrage linéaire avec une matrice de gain $\mathbf{F}$ diagonale et un offset $\mathbf{f}$ nul.

Supposons que l'estimation bruitée $\widetilde{\mathbf{x}}$ de $\widetilde{\mathbf{x}}^\star$ soit filtrée par un produit de Schur pour obtenir une estimation filtrée $\widehat{\mathbf{x}}$:

$$\widehat{\mathbf{x}} = \mathbf{h} \circ \widetilde{\mathbf{x}} \tag{3.57}$$

où $\mathbf{h}$ un vecteur de taille n appelé "gain du filtre". Le gain du filtre est choisi pour minimiser l'espérance du carré de la norme euclidienne de l'erreur de filtrage $\widehat{\mathbf{x}}^e$:

$$e = \mathbb{E}[\|\widehat{\mathbf{x}}^e\|^2] \tag{3.58}$$

Le minimum de e est atteint si :

$$\frac{\partial e}{\partial h_{i}} = \mathbb{E}\Big[2(h_{i}\widetilde{x}_{i} - \widetilde{x}_{i}^{\star})\widetilde{x}_{i}\Big] = 0 \tag{3.59}$$

ce qui équivaut à la condition d'orthogonalité entre $\widehat{\mathbf{x}}^{e}$ et $\widetilde{\mathbf{x}}$:

$$\mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{x}}^{e} \circ \widetilde{\mathbf{x}}\big] = 0 \tag{3.60}$$

Cette condition se transforme aisément en :

$$h_{i} = \frac{\mathbb{E}[\widetilde{x}_{i}\widetilde{x}_{i}^{\star}]}{\mathbb{E}[\widetilde{x}_{i}^{2}]} \tag{3.61}$$

Dans le cas où les hypothèses 3.40 et 3.41 sur l'erreur d'échantillonnage sont vérifiées, on obtient :

$$\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^{\star} \circ \widetilde{\mathbf{x}}\big] = \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^{\star} \circ \widetilde{\mathbf{x}}^{\star}\big] \tag{3.62}$$

ce qui permet de mettre le filtre de Schur optimal sous la forme :

$$h_{i} = \frac{\mathbb{E}\big[(\widetilde{x}_{i}^{\star})^{2}\big]}{\mathbb{E}\big[(\widetilde{x}_{i}^{\star})^{2}\big] + \mathbb{E}\big[(\widetilde{x}_{i}^{e})^{2}\big]} \tag{3.63}$$

Les propriétés du filtrage linéaire optimal 3.48, 3.50 et 3.51 peuvent alors être transposées directement pour le filtrage de Schur, donnant respectivement :

$$\mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{x}}^{e} \circ \widehat{\mathbf{x}}\big] = 0 \tag{3.64a}$$
$$\mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{x}}^{e} \circ \widehat{\mathbf{x}}^{e}\big] = \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^{\star} \circ \widetilde{\mathbf{x}}^{\star}\big] - \mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{x}} \circ \widehat{\mathbf{x}}\big] \tag{3.64b}$$
$$\mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^{\star} \circ \widetilde{\mathbf{x}}^{\star}\big] = \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}} \circ \widehat{\mathbf{x}}\big] = \mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{x}} \circ \widetilde{\mathbf{x}}\big] \tag{3.64c}$$

Il est important de noter que le filtrage de Schur est biaisé, car :

$$\mathbb{E}\big[\widehat{\mathbf{x}}^{e}\big] = \mathbb{E}\big[\mathbf{h} \circ \widetilde{\mathbf{x}} - \widetilde{\mathbf{x}}^{\star}\big] = (\mathbf{h} - \mathbf{1}) \circ \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}\big] \tag{3.65}$$

où $\mathbf{1}$ est un vecteur dont les éléments valent 1, et $h_{i} < 1$.

3.3. Critères de filtrage linéaire optimal des covariances

L'objectif de ce chapitre est de déterminer un critère de filtrage linéaire optimal des covariances se basant uniquement sur des quantités estimées à partir de l'ensemble et sur les sorties du filtre.

3.3.1. Moments asymptotiques aléatoires

D'un côté, dans la théorie de l'estimation des moments centrés (section 3.1), les moments asymptotiques $\widetilde{\mathbf{B}}^{\star}$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}^{\star}$ ne sont pas considérés comme des variables aléatoires, mais comme des données "fournies". De l'autre, dans la théorie du filtrage linéaire optimal (section 3.2), la vérité $\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}$ doit nécessairement être considérée une variable aléatoire. Cependant, les deux théories peuvent être combinées en considérant que $\widetilde{\mathbf{B}}^{\star}$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}^{\star}$ sont des réalisations uniques d'un processus aléatoire hypothétique (cf. citation de Deheuvels (1982) en exergue de l'introduction). La génération des moments centrés échantillonnés $\widetilde{\mathbf{B}}$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}$ est basée alors sur deux

processus aléatoires successifs :

1. Le premier, $\widetilde{\mathcal{R}}^\star$, est à l'origine des moments centrés asymptotiques d'ordre deux et quatre $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}^\star$.
2. Le second, $\widetilde{\mathcal{R}}$, est à l'origine des membres de l'ensemble $\{\widetilde{\mathbf{x}}_p^b\}_{1\leq p\leq N}$, dont les propriétés statistiques sont cohérentes avec les réalisations de $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}^\star$ obtenues après le premier processus aléatoire $\widetilde{\mathcal{R}}^\star$. Les moments centrés échantillonnés $\widetilde{\mathbf{B}}$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}$ sont ensuite calculés à partir de l'ensemble.

Si on suppose que ces processus aléatoires sont indépendants :

$$\widetilde{\mathcal{R}}^\star \perp\!\!\!\perp \widetilde{\mathcal{R}} \tag{3.66}$$

alors il est possible de tenir compte des deux processus aléatoires dans les statistiques des moments centrés échantillonnés. En reprenant les résultats démontrés dans l'annexe A.4.1, avec $\mathbf{x}$ remplacé par $\widetilde{\mathbf{B}}$, $\mathbf{a}$ par $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$, et $\mathbf{A}$ par $\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{B}}^e)$, les équations 3.23, 3.24, 3.20, 3.26 et 3.27 doivent être transformées puisque $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}^\star$ sont maintenant des variables aléatoires.

L'espérance de la covariance échantillonnée $\widetilde{B}_{ij}$ (équation 3.24) devient :

$$\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}] = \mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ij}] \tag{3.67}$$

La différence entre les équations 3.23 et 3.67 peut être comprise d'un point de vue expérimental comme si $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$ était différente pour chacun des N' sous-ensembles de taille N. Pour chaque sous-ensemble, $\widetilde{\mathbf{B}}$ tend vers sa propre réalisation $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$ du processus $\widetilde{\mathcal{R}}^\star$ si N tend vers l'infini. Pour N fini, la moyenne des $\widetilde{\mathbf{B}}$ sur tous les sous-ensembles converge vers $\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{B}}^\star]$ si N' tend vers l'infini.

La covariance des covariances échantillonnées $\widetilde{B}_{ij}$ et $\widetilde{B}_{kl}$ dans le cas général (équation 3.24) devient :

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}_{ij},\widetilde{B}_{kl}) &= \mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}^\star_{ij},\widetilde{B}^\star_{kl}) \\ &\quad + \frac{1}{N}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}^\star_{ijkl}] - \frac{1}{N}\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}] + \frac{1}{N(N-1)}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ik}\widetilde{B}^\star_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{il}\widetilde{B}^\star_{jk}]\Big)\end{aligned} \tag{3.68}$$

ce qui signifie que la covariance de l'erreur sur les covariances échantillonnées vaut :

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}^e_{ij},\widetilde{B}^e_{kl}) &= \mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}_{ij},\widetilde{B}_{kl}) - \mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}^\star_{ij},\widetilde{B}^\star_{kl}) \\ &= \frac{1}{N}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}^\star_{ijkl}] - \frac{1}{N}\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}] + \frac{1}{N(N-1)}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ik}\widetilde{B}^\star_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{il}\widetilde{B}^\star_{jk}]\Big)\end{aligned} \tag{3.69}$$

Dans le cas d'une distribution gaussienne (équation 3.20), on obtient de même :

$$\mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}_{ij},\widetilde{B}_{kl}) = \mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}^\star_{ij},\widetilde{B}^\star_{kl}) + \frac{1}{N-1}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ik}\widetilde{B}^\star_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{il}\widetilde{B}^\star_{jk}]\Big) \tag{3.70}$$

et pour l'erreur sur les covariances échantillonnées :

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}^e_{ij},\widetilde{B}^e_{kl}) &= \mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}_{ij},\widetilde{B}_{kl}) - \mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}^\star_{ij},\widetilde{B}^\star_{kl}) \\ &= \frac{1}{N-1}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ik}\widetilde{B}^\star_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{il}\widetilde{B}^\star_{jk}]\Big)\end{aligned} \tag{3.71}$$

L'espérance du moment centré d'ordre quatre échantillonné $\widetilde{\Xi}_{ijkl}$ dans le cas général (équation 3.26) devient :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijkl}] = &\frac{(N-1)(N^2-3N+3)}{N^3}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}^{\star}_{ijkl}] \\ &+ \frac{(N-1)(2N-3)}{N^3}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk}]\Big)\end{aligned} \tag{3.72}$$

et dans le cas d'une distribution gaussienne (équation 3.27) :

$$\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijkl}] = \frac{(N-1)^2}{N^2}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk}]\Big) \tag{3.73}$$

3.3.2. Équivalence du filtrage optimal et du critère d'optimalité

Théorème

Soient $\widetilde{\mathbf{B}}$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}$ les estimations brutes des covariances et du moment centré d'ordre quatre, estimées par les équations 3.5a et 3.5b à partir d'un ensemble de taille $N > 3$. Soit $\widehat{\mathbf{B}}$ l'estimation obtenue par un filtrage linéaire de l'estimation brute $\widetilde{\mathbf{B}}$, et $\widehat{\mathbf{B}}^e$ l'erreur de filtrage associée. Si les hypothèses 3.40, 3.41 et 3.66 sont vérifiées, alors les conditions d'optimalité 3.36a et 3.36b du filtrage linéaire sont équivalentes à un critère d'optimalité :

$$\left\{\begin{array}{rcl}\mathbb{E}[\widehat{B}^e_{ij}] &=& 0\\ \mathbb{E}[\widehat{B}^e_{ij}\widetilde{B}_{kl}] &=& 0\end{array}\right. \Leftrightarrow \left\{\begin{array}{rcl}\mathbb{E}[\widehat{B}_{ij}] &=& \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}]\\ \mathfrak{C}_{ijkl} &=& 0\end{array}\right. \tag{3.74}$$

où :

$$\begin{aligned}\mathfrak{C}_{ijkl} = &\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widetilde{B}_{kl}] - \frac{(N-2)^2}{N^2-3N+3}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] - \frac{N^2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijkl}] \\ &+ \frac{N-2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ik}\widehat{B}_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}_{il}\widehat{B}_{jk}]\Big)\end{aligned} \tag{3.75}$$

La démonstration de ce théorème est donnée dans l'annexe A.4.2.

Cas d'une distribution gaussienne

Dans l'hypothèse où la distribution de l'ensemble est gaussienne, les équations 3.51 et 3.73 permettent de simplifier le critère général 3.74 en :

$$\left\{\begin{array}{rcl}\mathbb{E}[\widehat{B}_{ij}] &=& \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}]\\ \mathfrak{C}^{\mathrm{G}}_{ijkl} &=& 0\end{array}\right. \tag{3.76}$$

où :

$$\mathfrak{C}^{\mathrm{G}}_{ijkl} = \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widetilde{B}_{kl}] - \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] - \frac{1}{N-1}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ik}\widehat{B}_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}_{il}\widehat{B}_{jk}]\Big) \tag{3.77}$$

3.3.3. Cas du filtrage de Schur

Théorème

Soient $\widetilde{\mathbf{B}}$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}$ les estimations brutes des covariances et du moment centré d'ordre quatre, estimées par les équations 3.5a et 3.5b à partir d'un ensemble de taille $N > 3$. Soit $\widehat{\mathbf{B}}$ l'estimation obtenue par un filtrage de Schur de l'estimation brute $\widetilde{\mathbf{B}}$, et $\widehat{\mathbf{B}}^e$ l'erreur de filtrage associée. Si les hypothèses 3.40, 3.41 et 3.66 sont vérifiées, alors la condition d'optimalité 3.60 du filtrage de Schur est équivalente à un critère d'optimalité :

$$\mathbb{E}[\widehat{B}^e_{ij}\widetilde{B}_{ij}] = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathfrak{C}^S_{ij} = 0 \tag{3.78}$$

où :

$$\begin{aligned}\mathfrak{C}^S_{ij} = \mathbb{E}[\widetilde{B}^2_{ij}] - \frac{N^3-5N^2+7N-2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{ij}] - \frac{N^2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijij}] \\ + \frac{N-2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ii}\widetilde{B}^\star_{jj}]\end{aligned} \tag{3.79}$$

La démonstration de ce théorème est donnée dans l'annexe A.4.2.

Le produit $\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ii}\widetilde{B}^\star_{jj}]$ qui apparaît dans le critère d'optimalité du filtrage de Schur ne peut pas être transformé, car la propriété d'orthogonalité de l'équation 3.60 ne s'applique pas aux produits croisés. Le traitement spécial de ce terme qui implique des valeurs asymptotiques est détaillé dans la section 4.2.

Cas d'une distribution gaussienne

Dans l'hypothèse où la distribution de l'ensemble est gaussienne, les équations 3.64c et 3.73 permettent de simplifier le critère général 3.78 en :

$$\mathfrak{C}^{SG}_{ij} = 0 \tag{3.80}$$

où :

$$\mathfrak{C}^{SG}_{ij} = \mathbb{E}[\widetilde{B}^2_{ij}] - \frac{N}{N-1}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{ij}] - \frac{1}{N-1}\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star_{ii}\widetilde{B}^\star_{jj}] \tag{3.81}$$

4 | Applications des critères de filtrage linéaire optimal des covariances

Ce chapitre reprend en les complétant des éléments de l'article Ménétrier, Montmerle, Michel et Berre (2014b), soumis à la revue Monthly Weather Review. Deux applications des critères de filtrage optimal des covariances d'erreur d'ébauche démontrés au chapitre précédent y sont développées : le filtrage spatial des variances et la localisation des covariances. Ces applications sont ensuite illustrées dans un cadre idéalisé.

Sommaire

4.1	**Filtrage des variances**	**73**
4.1.1	Enjeux et méthode	73
4.1.2	Filtrage homogène et isotrope	75
4.2	**Localisation des covariances**	**76**
4.2.1	Enjeux et méthode	76
4.2.2	Diagnostics de la fonction de localisation	78
4.2.3	Diagnostic du tenseur LCH de la fonction de localisation	79
4.3	**Illustration dans un cadre idéalisé**	**81**
4.3.1	Cadre analytique	81
4.3.2	Filtrage des variances	81
4.3.3	Localisation des covariances	85

4.1. Filtrage des variances

4.1.1. Enjeux et méthode

État de l'art

Comme il a été mentionné dans la section 1.4, les ensembles peuvent être utilisés pour estimer les paramètres d'un modèle de covariance déjà établi. Dans les centres qui utilisent cette approche, certains de ces paramètres sont estimés pendant une période de calibration puis utilisés de façon climatologique (comme les opérateurs de balance) tandis que d'autres sont calibrés au jour le jour à l'aide d'un ensemble quotidien (comme les autocovariances des variables non balancées). Ainsi, les variances des variables non balancées sont échantillonnées à chaque cycle d'assimilation à partir d'une assimilation d'ensemble de façon opérationnelle à Météo-France (Raynaud *et al.*, 2009; Berre et Desroziers, 2010) et au CEPMMT (Centre Européen de Prévisions Météorologiques à Moyen Terme), Bonavita *et al.* (2012)). Elles sont filtrées spatialement à l'aide d'un filtre spectral avant d'être utilisées. Comme détaillé ultérieurement dans la section 5.1.1, cette méthode essaie d'estimer le gain du filtre optimal par la formule 3.45a, ce qui nécessite des estimations des covariances du bruit et du signal.

La nouvelle méthode proposée ici suit une approche différente, puisqu'elle utilise les critères d'optimalité 3.74 et 3.76 en les simplifiant et en les rendant calculables.

Critères de filtrage des variances

Pour simplifier les notations, les coefficients diagonaux des matrices $\widetilde{\mathbf{B}}^{\star}$, $\widetilde{\mathbf{B}}$ et $\widehat{\mathbf{B}}$ sont rassemblés en vecteurs de variances $\widetilde{\mathbf{v}}^{\star}$, $\widetilde{\mathbf{v}}$ et $\widehat{\mathbf{v}}$, et le vecteur $\widetilde{\boldsymbol{\xi}}$ est tel que $\widetilde{\xi}_i = \widetilde{\Xi}_{iiii}$.

En combinant $\mathfrak{C}_{iijj}$ et $\mathfrak{C}_{ijij}$ de l'équation 3.75, il est possible de se passer des covariances filtrées, pour obtenir une nouvelle quantité $\mathfrak{C}_{ij}$ n'impliquant que des variances filtrées :

$$\begin{aligned}\mathfrak{C}_{ij} &= \frac{N^2-3N+1}{N^2-3N+3}\mathfrak{C}_{iijj} + \frac{2}{N^2-3N+3}\mathfrak{C}_{ijij} \\ &= \frac{N^2-3N+1}{N^2-3N+3}\mathbb{E}[\widetilde{v}_i\widetilde{v}_j] + \frac{2}{N^2-3N+3}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}^2] \\ &\quad - \frac{N(N-2)(N-3)}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{v}_i\widehat{v}_j] - \frac{N^2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijij}]\end{aligned} \tag{4.1}$$

car $\widetilde{\Xi}_{iijj} = \widetilde{\Xi}_{ijij}$. Si la distribution de l'ensemble est gaussienne, cette équation peut être simplifiée en :

$$\mathfrak{C}_{ij}^{\mathrm{G}} = \frac{N}{N-2}\mathbb{E}[\widetilde{v}_i\widetilde{v}_j] - \frac{2}{N-2}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}^2] - \frac{N+1}{N-1}\mathbb{E}[\widetilde{v}_i\widehat{v}_j] \tag{4.2}$$

Sous-critère basé uniquement sur les variances

Si l'on ne dispose pas des covariances estimées $\widetilde{\mathbf{B}}_{ij}$, le critère 3.74 peut être réduit à un sous-critère nécessaire, mais non suffisant pour assurer l'optimalité du filtre :

$$\left\{\begin{array}{rcl}\mathbb{E}[\widehat{v}_i] &=& \mathbb{E}[\widetilde{v}_i] \\ \mathfrak{C}_i &=& 0\end{array}\right. \tag{4.3}$$

où $\mathfrak{C}_i$ est tiré de l'équation 4.1 avec $i = j$:

$$\mathfrak{C}_i = \mathbb{E}[\widetilde{v}_i^2] - \frac{N(N-2)(N-3)}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{v}_i\widehat{v}_i] - \frac{N^2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{\xi}_i] \tag{4.4}$$

De manière similaire, si la distribution de l'ensemble est gaussienne, le critère 3.76 peut être réduit à :

$$\left\{\begin{array}{rcl}\mathbb{E}[\widehat{v}_i] &=& \mathbb{E}[\widetilde{v}_i] \\ \mathfrak{C}_i^{\mathrm{G}} &=& 0\end{array}\right. \tag{4.5}$$

où $\mathfrak{C}_i^{\mathrm{G}}$ est tiré de l'équation 4.2 avec $i = j$:

$$\mathfrak{C}_i^{\mathrm{G}} = \mathbb{E}[\widetilde{v}_i^2] - \frac{N+1}{N-1}\mathbb{E}[\widetilde{v}_i\widehat{v}_i] \tag{4.6}$$

On peut noter que ce résultat est cohérent avec l'équation 3.21 explicitant la covariance des covariances échantillonnées, transformée pour prendre en compte tous les processus aléatoires et réduite à la variance des variances brutes, en utilisant l'équation 3.51.

4.1.2. Filtrage homogène et isotrope

Choix d'une hypothèse d'ergodicité

Les critères $\mathfrak{C}_i$ et $\mathfrak{C}_i^{\mathrm{G}}$ sont complètement généraux, dans le sens où aucune hypothèse n'a été faite sur la façon de les calculer en pratique. Cependant, il est maintenant nécessaire de faire une hypothèse sur la manière d'estimer les espérances à partir des données disponibles (en général une unique réalisation), afin d'obtenir des formulations utilisables.

Diverses hypothèses d'ergodicité peuvent être envisagées, basées sur le lieu, l'échelle, ou la coordonnée de n'importe quelle base dans laquelle on décompose les variances brutes. En supposant que les espérances sont échantillonnées par m moyennes distinctes dans une certaine base et que le filtre dépende de m' paramètres, il est nécessaire d'avoir au moins un jeu des m' paramètres du filtre pour lesquels les m critères échantillonnés sont vérifiés.

Formulation dans le cas homogène et isotrope

Dans cette section, on choisit d'effectuer le filtrage par une convolution homogène avec un noyau isotrope, dépendant d'un seul paramètre (i.e. $m' = 1$) : sa longueur $\mathcal{L}^f$. Une telle longueur se doit d'être :

— suffisamment grande pour réduire significativement le bruit d'échantillonnage,

— suffisamment petite pour conserver le signal d'intérêt (i.e. les variances asymptotiques).

Ainsi, une hypothèse d'ergodicité spatiale est faite, afin d'estimer les espérances des critères d'optimalité par une moyenne spatiale μ^{S} (i.e. $m = 1$).

Dans le cas homogène, le critère 4.3 est transformé en :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \mu^{\mathrm{S}}(\widehat{\mathbf{v}}) & = & \mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}}) \\ \overline{\mathfrak{C}} & = & 0 \end{array} \right. \tag{4.7}$$

où $\overline{\mathfrak{C}}$ est tiré de l'équation 4.4 pour une moyenne spatiale μ^{S} :

$$\overline{\mathfrak{C}} = \mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}}^2) - \frac{N(N-2)(N-3)}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}} \circ \widehat{\mathbf{v}}) - \frac{N^2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\boldsymbol{\xi}}) \tag{4.8}$$

De manière similaire, si la distribution de l'ensemble est gaussienne, le critère 4.5 est transformé en :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \mu^{\mathrm{S}}(\widehat{\mathbf{v}}) & = & \mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}}) \\ \overline{\mathfrak{C}}^{\mathrm{G}} & = & 0 \end{array} \right. \tag{4.9}$$

où $\overline{\mathfrak{C}}^{\mathrm{G}}$ est tiré de l'équation 4.6 pour une moyenne spatiale μ^{S} :

$$\overline{\mathfrak{C}}^{\mathrm{G}} = \mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}}^2) - \frac{N+1}{N-1}\mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}} \circ \widehat{\mathbf{v}}) \tag{4.10}$$

Unicité des critères

Dans l'annexe A.4.3, on montre que si l'intensité du filtrage (i.e. la norme du signal retiré) augmente de façon monotone avec $\mathcal{L}^f$, ce qui est le cas pour les fonctions de filtrage usuelles (par exemple : gaussiennes, lorentziennes, etc.), alors $\overline{\mathfrak{C}}$ et $\overline{\mathfrak{C}}^{\mathrm{G}}$ croissent de façon monotone en fonction de $\mathcal{L}^f$. Par conséquent, les critères $\overline{\mathfrak{C}}$ et $\overline{\mathfrak{C}}^{\mathrm{G}}$ sont vérifiés pour une unique valeur de $\mathcal{L}^f$,

et cette valeur peut être déterminée itérativement. Des algorithmes rapides comme la méthode de dichotomie sont très bien adaptés pour cette tâche.

Tout d'abord, une longueur de filtrage $\mathcal{L}^f$ suffisamment grande est choisie. Ensuite, les variances brutes $\widetilde{\mathbf{v}}$ sont filtrées avec un filtre normalisé (i.e. conservant la moyenne spatiale $\mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}})$) de longueur $\mathcal{L}^f$ pour obtenir $\widehat{\mathbf{v}}$. Les quantités $\overline{\mathfrak{C}}$ ou $\overline{\mathfrak{C}}^{\mathrm{G}}$ sont calculées, et si elles sont positives (respectivement négative), alors la valeur de $\mathcal{L}^f$ est réduite (respectivement augmentée), et le processus recommence.

En pratique, 10 itérations environ sont suffisantes pour obtenir une précision satisfaisante sur $\mathcal{L}^f$. Par exemple, avec un algorithme de dichotomie simple, si la longueur de filtrage maximum est estimée à 500 km, alors la longueur de départ est fixée à 250 km, et après 10 itérations la précision obtenue est de $250/2^{10} \simeq 0,24$ km, ce qui est généralement satisfaisant en pratique. Toutefois, il est possible de poursuivre les itérations jusqu'à ce que la précision de la machine soit atteinte.

4.2. Localisation des covariances

4.2.1. Enjeux et méthode

État de l'art

Comme on l'a mentionné dans la section 1.4 pour les algorithmes du type EnKF et 4D-EnVar, les covariances brutes échantillonnées à partir de l'ensemble sont généralement multipliées par un coefficient de localisation avant d'être utilisées dans l'algorithme. Le but d'une telle localisation est de supprimer progressivement toute corrélation à partir d'une certaine distance, et de limiter ainsi le bruit d'échantillonnage dans les covariances totales. La détermination objective de la fonction de localisation demeure cependant un sujet peu traité, une option simple étant de l'ajuster manuellement, ce qui nécessite beaucoup de ressources et doit être réitéré à chaque modification du système d'assimilation. Pour les filtres dérivés de l'EnKF, qui calculent les covariances en partant de l'espace des observations, plusieurs techniques ont été proposées :

- utiliser une série de "filtres hiérarchiques" permettant de détecter l'erreur d'échantillonnage pour la minimiser, mais avec un coût de calcul élevé (Anderson, 2007).
- utiliser une régression linéaire pour minimiser l'erreur quadratique entre l'analyse moyenne de l'ensemble et une estimation maximisant la vraisemblance (Anderson, 2012), ou se basant sur les résultats d'une expérience de simulation d'un système d'observation (Anderson et Lei, 2013).
- élever une fonction de corrélation à une certaine puissance (méthodes SENCORP de Bishop et Hodyss (2007) et ECO-RAP de Bishop et Hodyss (2009a,b)).

Cette dernière technique peut être adaptée pour les méthodes variationnelles de type 4D-EnVar (Bishop et Hodyss, 2011). Ainsi, Clayton *et al.* (2012) utilisent une puissance de la corrélation verticale issue de covariances d'erreur d'ébauche modélisées pour construire la localisation verticale. Dans cette méthode, le choix de l'exposant auquel sont élevées les corrélations (potentiellement lissées) reste arbitraire, et doit être ajusté manuellement.

On se propose ici d'estimer des fonctions de localisation adaptatives déduite de l'ensemble lui-même, sans ajustement manuel et à un coût très accessible, à partir des critères de filtrage de Schur optimal définis au chapitre précédent.

Localisation par produit de Schur

La localisation d'une matrice de covariance brute $\widetilde{\mathbf{B}}$ est effectuée par un produit de Schur avec une matrice $\mathbf{L}$, pour obtenir une matrice filtrée $\widehat{\mathbf{B}}$:

$$\widehat{\mathbf{B}} = \mathbf{L} \circ \widetilde{\mathbf{B}} \tag{4.11}$$

Le théorème du produit de Schur (Schur, 1911) assure que le produit de Schur de deux matrices semi-définie positive est aussi une matrice semi-définie positive. Ainsi, si $\mathbf{L}$ est une matrice symétrique semi-définie positive, alors $\widehat{\mathbf{B}}$ l'est aussi. Avec cette formulation, une racine carrée de la matrice de covariance filtrée $\widehat{\mathbf{B}}$ est facilement accessible (Lorenc, 2003; Buehner, 2005) :

$$\delta\mathbf{x} = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{p=1}^{N} \delta\widetilde{\mathbf{x}}^b_p \circ (\mathbf{L}^{1/2}\boldsymbol{\alpha}_p) \tag{4.12}$$

où $\boldsymbol{\alpha}_p$ est le segment d'une variable de contrôle étendue correspondant à $\delta\widetilde{\mathbf{x}}^b_p$.

Localisation optimale théorique

Comme $\widehat{B}_{ij} = L_{ij}\widetilde{B}_{ij}$, le produit de l'équation 3.64c peut être simplifié en :

$$\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{ij}] = L_{ij}\mathbb{E}[\widetilde{B}^2_{ij}] \tag{4.13}$$

Ainsi, il est possible d'extraire le coefficient de localisation L_{ij} dans les critères d'optimalité du filtrage de Schur $\mathfrak{C}^{\mathrm{S}}_{ij}$ de l'équation 3.79 :

$$\begin{aligned} L_{ij} = {} & \frac{(N-1)(N^2-3N+3)}{N^3-5N^2+7N-2} - \frac{N^2}{N^3-5N^2+7N-2}\frac{\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijij}]}{\mathbb{E}[\widetilde{B}^2_{ij}]} \\ & + \frac{N-2}{N^3-5N^2+7N-2}\frac{\mathbb{E}[\widetilde{v}^\star_i\widetilde{v}^\star_j]}{\mathbb{E}[\widetilde{B}^2_{ij}]} \end{aligned} \tag{4.14}$$

et si la distribution de l'ensemble est gaussienne, le critère d'optimalité simplifié $\mathfrak{C}^{\mathrm{SG}}_{ij}$ de l'équation 3.81 donne :

$$L^{\mathrm{G}}_{ij} = \frac{N-1}{N} - \frac{1}{N}\frac{\mathbb{E}[\widetilde{v}^\star_i\widetilde{v}^\star_j]}{\mathbb{E}[\widetilde{B}^2_{ij}]} \tag{4.15}$$

Dans les expressions de L_{ij} et L^{G}_{ij}, le terme $\mathbb{E}[\widetilde{v}^\star_i\widetilde{v}^\star_j]$ est toujours un obstacle pour l'estimation de la localisation, qui peut être cependant surmonté en pratique à travers deux stratégies présentées dans la suite.

On rappelle que le filtre de Schur optimal est biaisé, et que son gain est toujours inférieur à 1 comme le montre l'équation 3.63. Contrairement à ce que l'on trouve généralement dans la littérature, les fonctions de localisation diagnostiquées dans la suite ne sont donc pas des fonctions de corrélation, car elles ne valent pas 1 à séparation nulle. En pratique, cela signifie que la localisation cherche aussi à diminuer le bruit d'échantillonnage sur les variances, en diminuant la valeur de celles-ci.

4.2.2. Diagnostics de la fonction de localisation

Diagnostic utilisant les variances filtrées

Le produit de variances asymptotiques $\mathbb{E}[\widetilde{v}_i^\star \widetilde{v}_j^\star]$ peut être estimé si les variances sont filtrées linéairement avant l'étape de localisation, et si ce filtrage est optimal. En effet, pour un filtrage linéaire optimal des variances, l'équation 3.51 donne :

$$\mathbb{E}[\widetilde{v}_i^\star \widetilde{v}_j^\star] = \mathbb{E}[\widetilde{v}_i \widehat{v}_j] \tag{4.16}$$

Diagnostic utilisant les corrélations échantillonnées

Si la distribution de l'ensemble est gaussienne, les équations 3.70 et 4.13 donnent :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\widetilde{v}_i \widetilde{v}_j] &= \mathbb{E}[\widetilde{v}_i^\star \widetilde{v}_j^\star] + \frac{2}{N-1}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}^{\star 2}] \\ &= \mathbb{E}[\widetilde{v}_i^\star \widetilde{v}_j^\star] + \frac{2}{N-1} L_{ij}^{\mathrm{G}} \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}^2]\end{aligned} \tag{4.17}$$

En définissant l'élément de la matrice des corrélations échantillonnées $\widetilde{\mathbf{C}}$ par : $\widetilde{C}_{ij} = \widetilde{B}_{ij}/\sqrt{\widetilde{v}_i \widetilde{v}_j}$, on peut séparer $\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}^2]$ en :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}^2] &= \mathbb{E}[\widetilde{v}_i \widetilde{v}_j]\mathbb{E}[\widetilde{C}_{ij}^2] + \mathrm{Cov}\left(\widetilde{v}_i \widetilde{v}_j, \widetilde{C}_{ij}^2\right) \\ &= \mathbb{E}[\widetilde{v}_i \widetilde{v}_j]\mathbb{E}[\widetilde{C}_{ij}^2](1 + \widetilde{\varepsilon}_{ij})\end{aligned} \tag{4.18}$$

avec :

$$\widetilde{\varepsilon}_{ij} = \frac{\mathrm{Cov}\left(\widetilde{v}_i \widetilde{v}_j, \widetilde{C}_{ij}^2\right)}{\mathbb{E}[\widetilde{v}_i \widetilde{v}_j]\mathbb{E}[\widetilde{C}_{ij}^2]} \tag{4.19}$$

Au premier ordre en $\widetilde{\varepsilon}_{ij} \ll 1$, la formule 4.15 devient ainsi :

$$L_{ij}^{\mathrm{GC}} = \frac{(N-1)}{(N+1)(N-2)}\left((N-1) - \frac{1}{\mathbb{E}[\widetilde{C}_{ij}^2]}\right) \tag{4.20}$$

Comme les corrélations échantillonnées $\widetilde{C}_{ij}$ sont bornées entre -1 et 1, les estimations de $\mathbb{E}[\widetilde{C}_{ij}^2]$ par des moyennes spatiales et angulaires sont plutôt robustes, même si $\widetilde{\mathbf{C}}$ est hétérogène et anisotrope. Cependant, la précision de l'approximation $\widetilde{\varepsilon}_{ij} \ll 1$ ne peut pas être quantifiée analytiquement. En effet, elle dépend de la taille de l'ensemble N et de moments plus élevés de la distribution de $\widetilde{\mathbf{B}}^\star$. Néanmoins, cette approximation devrait être meilleure à faibles séparations, pour lesquelles $\widetilde{C}_{ij}$ converge vers 1, de telle sorte que $\widetilde{\varepsilon}_{ij}$ converge vers 0.

Moyennes spatiales et angulaires

Afin d'estimer les espérances intervenant dans les expressions des différentes fonctions de localisation, il est nécessaire de faire une hypothèse d'ergodicité. Comme pour le filtrage des variances, plusieurs hypothèses peuvent être envisagées, mais on se contentera de la plus simple : l'hypothèse d'ergodicité spatiale et angulaire, qui conduit à des fonctions de localisation homogènes et isotropes. En pratique, les moyennes spatiales et angulaires, combinées dans un opérateur μ^{SA}, sont calculées par un échantillonnage aléatoire pour les systèmes de grande taille. En notant $\widetilde{\boldsymbol{X}}$ et $\widetilde{\boldsymbol{V}}^\star$ les matrices telles que $\widetilde{X}_{ij} = \widetilde{\Xi}_{ijij}$ et $\widetilde{V}_{ij}^\star = \widetilde{v}_i \widehat{v}_j$, les formules 4.14,

4.15 et 4.20 sont transformées en :

$$\bar{\mathbf{L}} = \frac{(N-1)(N^2-3N+3)}{N^3-5N^2+7N-2} - \frac{N^2}{N^3-5N^2+7N-2}\frac{\mu^{\mathrm{SA}}(\widetilde{\boldsymbol{X}})}{\mu^{\mathrm{SA}}(\widetilde{\mathbf{B}}\circ\widetilde{\mathbf{B}})} + \frac{N-2}{N^3-5N^2+7N-2}\frac{\mu^{\mathrm{SA}}(\widetilde{\boldsymbol{V}}^{\star})}{\mu^{\mathrm{SA}}(\widetilde{\mathbf{B}}\circ\widetilde{\mathbf{B}})} \tag{4.21a}$$

$$\bar{\mathbf{L}}^{\mathrm{G}} = \frac{N-1}{N} - \frac{1}{N}\frac{\mu^{\mathrm{SA}}(\widetilde{\boldsymbol{V}}^{\star})}{\mu^{\mathrm{SA}}(\widetilde{\mathbf{B}}\circ\widetilde{\mathbf{B}})} \tag{4.21b}$$

$$\bar{\mathbf{L}}^{\mathrm{GC}} = \frac{(N-1)}{(N+1)(N-2)}\left((N-1) - \frac{1}{\mu^{\mathrm{SA}}(\widetilde{\mathbf{C}}\circ\widetilde{\mathbf{C}})}\right) \tag{4.21c}$$

4.2.3. Diagnostic du tenseur LCH de la fonction de localisation

La fonction de localisation étant définie positive, il est possible de la normaliser pour obtenir une fonction de corrélation, à partir de laquelle on peut diagnostiquer un tenseur LCH défini dans le chapitre 2 et dans l'annexe A.1.1. On montre dans cette section qu'il existe une relation entre les tenseurs LCH des fonctions de corrélation et de localisation locales. Il est donc possible de diagnostiquer simplement la localisation en fonction du tenseu LCH des fonctions de corrélation et de la taille de l'ensemble. La précision et l'utilité de cette formulation seront discutées au chapitre 5.

En supposant que les hypothèses de la section précédente soient toujours valides, on se concentre sur la forme de la fonction de localisation à séparation nulle. En transposant l'équation 4.20 dans une représentation continue, on obtient :

$$L^{\mathrm{GC}}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{(N-1)}{(N+1)(N-2)}\left((N-1) - \frac{1}{\mathbb{E}[\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')^2]}\right) \tag{4.22}$$

où $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ sont les vecteurs de position d'un espace de dimension d. Sachant que :

$$L^{\mathrm{GC}}(\mathbf{r},\mathbf{r}) = (N-1)/(N+1) \tag{4.23}$$

la fonction de localisation L^{GC} peut être normalisée pour obtenir :

$$L^{\mathrm{GCN}}(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{L^{\mathrm{GC}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')}{L^{\mathrm{GC}}(\mathbf{r},\mathbf{r})} = \frac{1}{N-2}\left((N-1) - \frac{1}{\mathbb{E}[\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')^2]}\right) \tag{4.24}$$

Le tenseur LCH, défini dans la section 2.2.3, permet de caractériser la forme de la fonction de corrélation à son origine. Ainsi, on définit le tenseur $\widetilde{\boldsymbol{H}}$ par :

$$\widetilde{\boldsymbol{H}}(\mathbf{r}) = -\nabla\nabla^{\mathrm{T}}\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \tag{4.25}$$

Dans la pratique, le tenseur $\widetilde{\boldsymbol{H}}$ peut être estimé à partir d'un ensemble, comme on le détaille dans la section 2.2.3 et dans l'annexe A.1.3.

Le tenseur $\boldsymbol{\Lambda}^{\mathrm{GCN}}(\mathbf{r})$ associé avec la fonction de localisation normalisée $L^{\mathrm{GCN}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ est défini par :

$$\boldsymbol{\Lambda}^{\mathrm{GCN}}(\mathbf{r}) = -\nabla\nabla^{\mathrm{T}}L^{\mathrm{GCN}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \tag{4.26}$$

En notant que la fonction de corrélation $\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ suit les propriétés suivantes :

$$\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}) = 1 \tag{4.27a}$$

$$\nabla\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = 0 \tag{4.27b}$$

et en notant que l'espérance et les dérivations spatiales commutent, on montre que :

$$\mathbb{E}[\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r})^2] = 1 \tag{4.28a}$$

$$\nabla\Big(\mathbb{E}[\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')^2]\Big)\Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = 0 \tag{4.28b}$$

Une dérivation au second ordre, avec l'aide des équations 4.27a et 4.27b, donne :

$$\begin{aligned}\nabla\nabla^{\mathrm{T}}\left(\frac{1}{\mathbb{E}[\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')^2]}\right)\Bigg|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} &= -\nabla\nabla^{\mathrm{T}}\mathbb{E}[\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')^2]\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \\ &= -2\nabla\nabla^{\mathrm{T}}\mathbb{E}[\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')]\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'}\end{aligned} \tag{4.29}$$

de telle sorte que :

$$\nabla\nabla^{\mathrm{T}}L^{\mathrm{GC}}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = \frac{2}{N-2}\nabla\nabla^{\mathrm{T}}\mathbb{E}[\widetilde{C}(\mathbf{r},\mathbf{r}')]\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \tag{4.30}$$

ce qui équivalent à

$$\boldsymbol{\Lambda}^{\mathrm{GCN}}(\mathbf{r}) = \frac{2}{N-2}\mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{H}}(\mathbf{r})] \tag{4.31}$$

où l'on a utilisé la commutation entre l'espérance et les dérivations spatiales.

Dans l'annexe A.1.1, on détaille le calcul d'une longueur de portée $\widetilde{\mathcal{L}}^b$ à partir d'un tenseur $\widetilde{\boldsymbol{H}}$, par :

$$\widetilde{\mathcal{L}}^b = \det(\widetilde{\boldsymbol{H}})^{-1/(2d)} \tag{4.32}$$

De manière similaire la longueur de localisation $\mathcal{L}^{\mathrm{L}}$ à partir du tenseur $\boldsymbol{\Lambda}^{\mathrm{GCN}}$ par :

$$\mathcal{L}^{\mathrm{L}} = \det(\boldsymbol{\Lambda}^{\mathrm{GCN}})^{-1/(2d)} \tag{4.33}$$

En utilisant l'équation 4.31, on montre aisément que $\widetilde{\mathcal{L}}^b$ et $\mathcal{L}^{\mathrm{L}}$ sont liées par :

$$\mathcal{L}^{\mathrm{L}} = \sqrt{\frac{N-2}{2}}\widetilde{\mathcal{L}}^b \tag{4.34}$$

En pratique l'équation 4.31 est transformée en représentation discrète, l'espérance étant remplacée par une moyenne spatiale :

$$\overline{\boldsymbol{\Lambda}}^{\mathrm{GCN}} = \frac{2}{N-2}\mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\boldsymbol{H}}) \tag{4.35}$$

d'où la longueur $\overline{\mathcal{L}}^{\mathrm{GCN}}$ associée.

4.3. Illustration dans un cadre idéalisé

L'objectif de cette section est de fournir une illustration simple des méthodes présentées précédemment, dans un cadre 1D idéalisé.

4.3.1. Cadre analytique

Pour s'affranchir des problèmes de résolution et de taille de domaine, on travaille désormais dans une représentation 1D continue dans un domaine infini. On définit un modèle simplifié de covariance asymptotique $\widetilde{B}^\star(x,x')$, comprenant des variances hétérogènes $\widetilde{v}^\star(x)$ et des corrélations homogènes $\widetilde{C}^\star(x-x')$. On suppose que les variances asymptotiques sont générées par un processus aléatoire d'espérance unitaire et de covariance homogène $s^2\widetilde{\Gamma}^\star(x-x')$, où s est l'écart-type de $\widetilde{v}^\star(x)$ et $\widetilde{\Gamma}^\star$ sa fonction de corrélation. Pour simplifier le problème, la fonction de corrélation asymptotique $\widetilde{C}^\star$ est supposée identique à chaque réalisation du processus aléatoire $\widetilde{\mathcal{R}}^\star$ qui la génère, sans variabilité aucune. La coordonnée spatiale est normalisée de sorte que la longueur de corrélation $\mathcal{L}^b$ de $\widetilde{C}^\star$ soit unitaire. Finalement, on suppose que la distribution de l'ensemble est gaussienne, de sorte que la covariance des covariances échantillonnées puisse être exprimée en fonction des quantités précédemment définies.

4.3.2. Filtrage des variances

Filtrage dans un cadre continu

Dans un cadre continu, le filtrage linéaire homogène des variances est donné par la convolution avec un noyau F :

$$\widehat{v}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(x-x')\widetilde{v}(x')\ \mathrm{d}x' \tag{4.36}$$

L'équation 4.6 peut donc être exprimée dans ce cadre par :

$$\begin{aligned}\mathfrak{C}^{\mathrm{G}}(x) &= \mathbb{E}\big[\widetilde{v}(x)^2\big] - \frac{N+1}{N-1}\mathbb{E}\big[\widetilde{v}(x)\widehat{v}(x')\big] \\ &= \mathbb{E}\big[\widetilde{v}(x)^2\big] - \frac{N+1}{N-1}\int_{-\infty}^{\infty} F(x-x')\mathbb{E}\big[\widetilde{v}(x)\widetilde{v}(x')\big]\ \mathrm{d}x'\end{aligned} \tag{4.37}$$

Comme le produit de fonctions gaussiennes est également une fonction gaussienne, et que l'intégrale d'une fonction gaussienne est connue, on définit F comme un noyau gaussien normalisé de longueur $\mathcal{L}^f$ et on suppose que $\widetilde{\Gamma}^\star$ et $\widetilde{C}^\star$ sont aussi des noyaux gaussiens de longueurs respectives $\mathcal{L}^v$ et $\mathcal{L}^b$:

$$F(x-x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\mathcal{L}^f}\exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2(\mathcal{L}^f)^2}\right) \tag{4.38a}$$

$$\widetilde{\Gamma}^\star(x-x') = \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2(\mathcal{L}^v)^2}\right) \tag{4.38b}$$

$$\widetilde{C}^\star(x-x') = \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{2(\mathcal{L}^b)^2}\right) \tag{4.38c}$$

Ainsi, l'équation 4.37 peut être calculée explicitement, pour obtenir :

$$\begin{aligned}\mathfrak{C}^{\mathrm{G}}(x) = (1+s^2)(1+\frac{2}{N-1}) \\ - \frac{N+1}{N-1}\Big(1 + s^2(1+(\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^v)^2)^{-1/2} + \frac{2}{N-1}(1+2(\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^b)^2)^{-1/2} \\ + s^2\frac{2}{N-1}(1+(\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^v)^2 + 2(\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^b)^2)^{-1/2}\Big)\end{aligned} \tag{4.39}$$

Finalement, on peut déterminer numériquement la longueur de filtrage $\mathcal{L}^f$ telle que $\mathfrak{C}^{\mathrm{G}}(x) = 0$, pour chaque jeu de paramètres.

La figure 4.1 montre une comparaison du filtre déterminé par le critère pour un noyau gaussien F et du filtre théorique F_{th} donné par l'équation 3.45a et transposée dans un cadre continu ici :

$$\int_{-\infty}^{\infty} F_{\mathrm{th}}(x-x')\,\mathrm{Cov}\,(\widetilde{v})(x')\;\mathrm{d}x' = \mathrm{Cov}\,(\widetilde{v}^\star)(x) \tag{4.40}$$

Bien que des différences soient visibles à l'origine et à séparation non nulle (dues à la sous-optimalité du filtre gaussien choisi), les deux filtres sont globalement similaires. De plus, l'utilisation du critère permet d'obtenir un filtre strictement positif, ce qui est nécessaire pour garantir la positivité des variances filtrées.

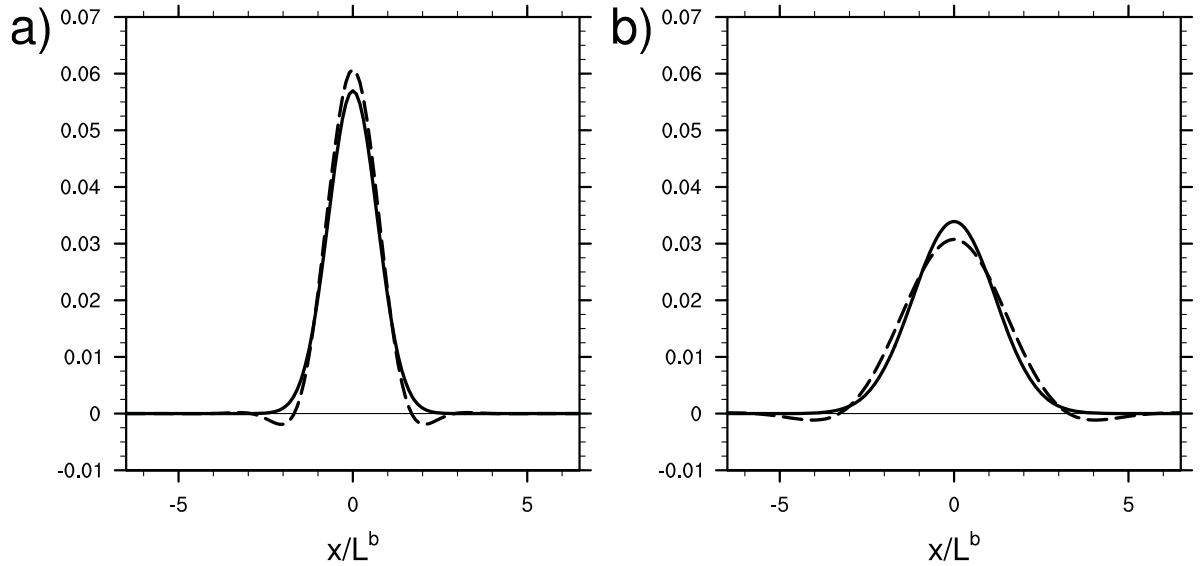


Figure 4.1. – Fonctions de filtrage des variances obtenues pour une ensemble de 10 membres, en annulant l'équation 4.39 pour un filtre gaussien (trait plein) et avec le filtre théorique 3.45a (tiretés). L'écart-type des variances asymptotiques s vaut 2 et leur échelle caractéristique $\mathcal{L}^v/\mathcal{L}^b$ vaut 1 (a) ou 2 (b).

Erreur de filtrage

Pour tout filtrage linéaire homogène, l'erreur de filtrage quadratique moyenne est donnée par $e(x) = \mathbb{E}[\widehat{v}^e(x)^2]$. Si toutes les fonctions impliquées sont gaussiennes, $e(x)$ peut aussi être

calculée explicitement :

$$e(x) = s^2\Big(1 + \big(1 + 2(\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^v)^2\big)^{-1/2} - 2\big(1 + (\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^v)^2\big)^{-1/2}\Big) + \frac{2}{N-1}\big(1 + 4(\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^b)^2\big)^{-1/2} + s^2\frac{2}{N-1}\big(1 + 2(\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^v)^2 + 4(\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^b)^2\big)^{-1/2} \tag{4.41}$$

Les équations 4.39 et 4.41 sont très utiles pour appréhender l'efficacité d'un filtrage homogène, et la capacité du sous-critère simplifié 4.9, correspondant à une convolution homogène avec un noyau isotrope pour un ensemble de distribution gaussienne, à déterminer la longueur de filtrage optimale.

Comportement du filtre

Dans ce cadre idéalisé, trois paramètres sont pertinents pour évaluer le comportement du filtre :

1. La taille de l'ensemble N est directement impliquée dans l'amplitude du bruit d'échantillonnage, comme le montrent les équations 3.69 ou 3.71. Une plus grande longueur de filtrage $\mathcal{L}^f$ et un filtrage de plus forts impacts sont attendus quand N diminue, puisque le bruit d'échantillonnage augmente.
2. L'échelle de variation des variances asymptotiques est donnée par $\mathcal{L}^v$, et comparée à l'échelle caractéristique du bruit d'échantillonnage, donnée par $\mathcal{L}^b/\sqrt{2}$ (Raynaud *et al.*, 2009). Une plus grande longueur de filtrage $\mathcal{L}^f$ et un filtrage de plus fort impact sont attendus quand $\mathcal{L}^v/\mathcal{L}^b$ augmente, car le signal des variances asymptotiques et le bruit d'échantillonnage sont alors plus facilement séparés.
3. L'écart-type des variances asymptotiques relativement à leur valeur moyenne est donnée par s. Il est évident, à partir des équations 3.69 ou 3.71, que le bruit d'échantillonnage est plus intense lorsque les variances asymptotiques sont les plus élevées, de sorte que les contrastes spatiaux dans l'amplitude du bruit d'échantillonnage augmentent avec s. Une plus grande longueur de filtrage $\mathcal{L}^f$ et un filtrage de plus fort impact sont attendus quand s diminue pour deux raisons : l'amplitude du bruit est plus homogène, et un filtrage plus intense peut être appliqué sans dégrader significativement le signal des variances asymptotiques.

Les variations de la longueur de filtrage $\mathcal{L}^f$ déterminées par le critère 4.39, en fonction des paramètres pertinents, sont données dans la figure 4.2. Comme attendu, une plus grande longueur de filtrage $\mathcal{L}^f$ est obtenue quand les variances asymptotiques ont une échelle caractéristique $\mathcal{L}^v$ plus importante, tandis que $\mathcal{L}^f$ diminue quand l'écart-type s et la taille de l'ensemble N augmentent. Ainsi, le critère 4.9 fournit un filtre dont la longueur s'ajuste de manière cohérente avec la texture et l'incertitude des variances brutes.

La figure 4.3 confirme que le filtrage est davantage bénéfique, en ce qui concerne la variation relative de l'erreur quadratique moyenne $e(x)$, pour des variances ayant une grande échelle spatiale $\mathcal{L}^v$, avec un écart-type s réduit et un ensemble de petite taille N.

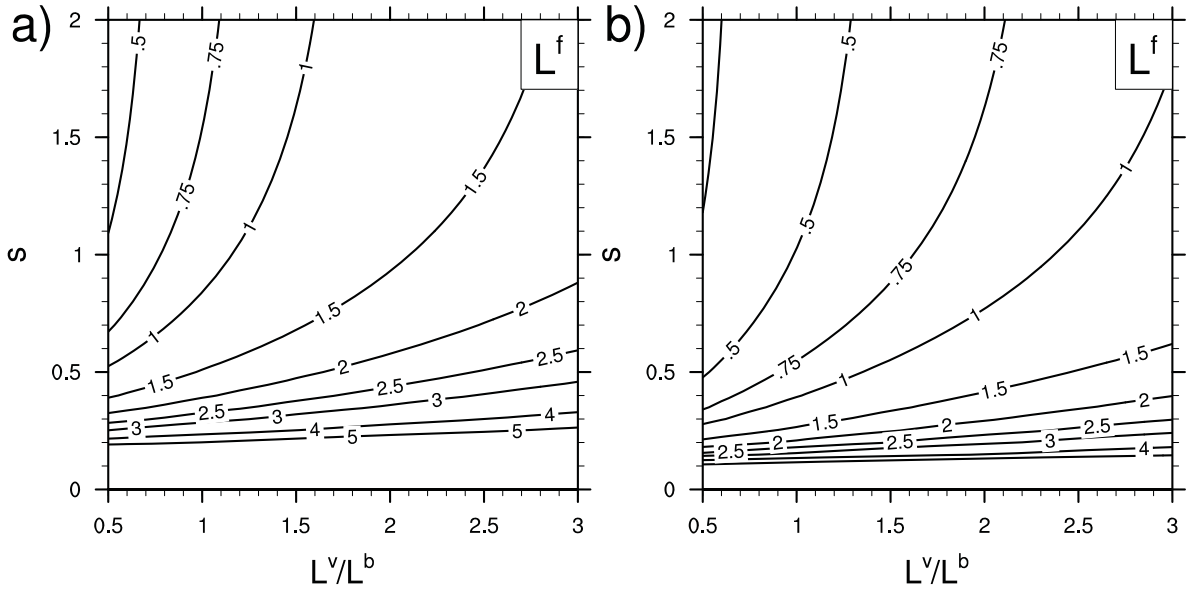


Figure 4.2. – Longueur de filtrage des variances $\mathcal{L}^f$ obtenues en annulant l'équation 4.39, en fonction de l'écart-type s et de l'échelle caractéristique $\mathcal{L}^v/\mathcal{L}^b$ des variances asymptotiques, pour des ensembles de 10 (a) et de 30 membres (b).

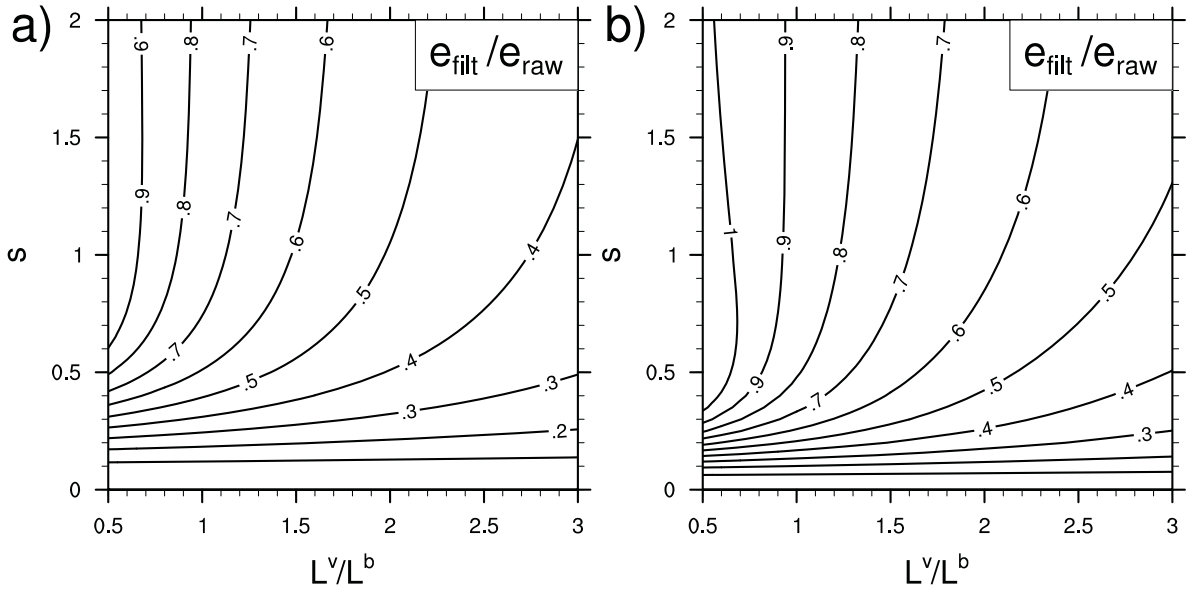


Figure 4.3. – Ratio de l'erreur quadratique moyenne $e(x)$ déduite de l'équation 4.41 après et avant le filtrage des variances obtenu en annulant l'équation 4.39, en fonction de l'écart-type s et de l'échelle caractéristique $\mathcal{L}^v/\mathcal{L}^b$ des variances asymptotiques, pour des ensembles de 10 (a) et de 30 membres (b).

En ce qui concerne l'optimalité de la longueur de filtrage déterminée par le critère 4.39, la figure 4.4 montre que c'est presque le cas, même si la longueur de filtrage est surestimée pour de petits ensembles en raison de la sous-optimalité du filtre gaussien choisi. Cependant, ce léger sur-filtrage semble plus acceptable qu'un sous-filtrage pour les applications en prévision numérique du temps.

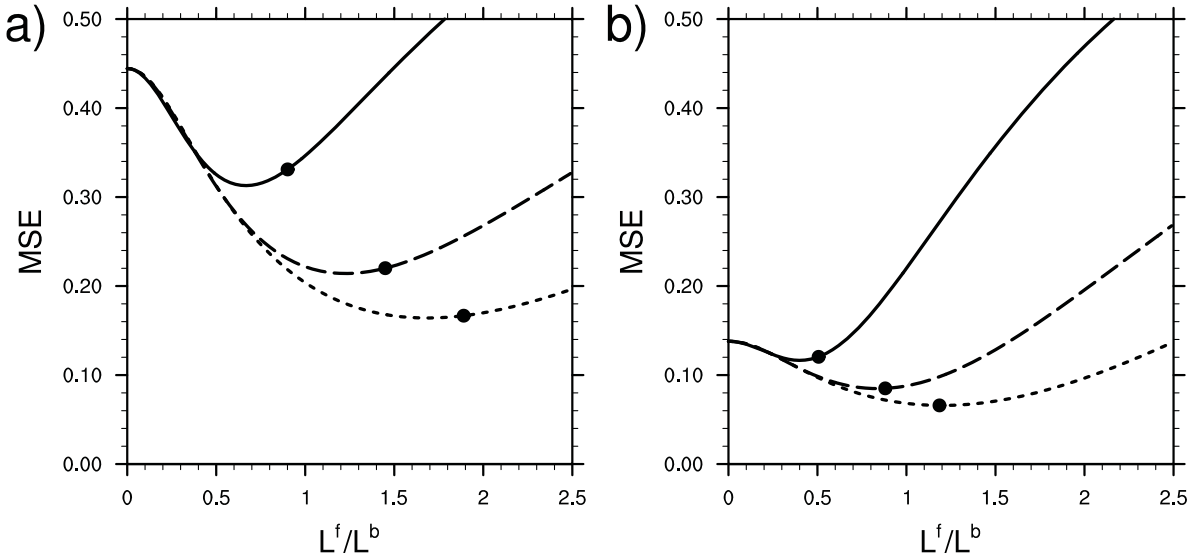


Figure 4.4. – Erreur quadratique moyenne $e(x)$ déduite de l'équation 4.41 pour des variances filtrées avec un noyau gaussien, en fonction de la longueur de filtrage $\mathcal{L}^f/\mathcal{L}^b$, pour des ensembles de 10 (a) et de 30 membres (b). La covariance des variances asymptotiques a une amplitude $s = 2$ et une échelle caractéristique $\mathcal{L}^v/\mathcal{L}^b$ valant 1 (trait plein), 2 (tireté) et 3 (pointillés). Les points noirs indiquent les valeurs calculées en annulant l'équation 4.39.

4.3.3. Localisation des covariances

Localisation optimale dans un cadre idéalisé

Dans le cas où la distribution de l'ensemble est gaussienne, la variance de l'erreur d'échantillonnage de la covariance, égale à l'espérance de cette erreur d'échantillonnage au carré, peut être déduite de l'équation 3.71 :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\widetilde{B}^e(x,x')^2] &= \mathrm{Var}\left(\widetilde{B}(x,x')\right) - \mathrm{Var}\left(\widetilde{B}(x,x')^\star\right) \\ &= \frac{1}{N-1}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}^\star(x,x')^2] + \mathbb{E}[\widetilde{v}^\star(x)\widetilde{v}^\star(x')]\Big)\end{aligned} \tag{4.42}$$

de telle sorte que la localisation optimale de l'équation 4.15 peut être exprimée dans notre cadre simplifié comme une fonction de la corrélation asymptotique uniquement :

$$L^{\mathrm{G}}(x-x') = \frac{N-1}{N}\left(1 - \frac{1}{1+N\widetilde{C}^\star(x-x')^2}\right) \tag{4.43}$$

La longueur associée $\mathcal{L}^{\mathrm{L}}$, obtenue par le même calcul que pour l'équation 4.34, est donnée par :

$$\mathcal{L}^{\mathrm{L}} = \sqrt{\frac{(N+1)^2}{2(N-1)}}\mathcal{L}^b \tag{4.44}$$

Les fonctions de localisation calculées par l'équation 4.43 sont illustrées par la figure 4.5 pour plusieurs tailles d'ensemble et pour des formes de corrélation asymptotique gaussienne et lorentzienne. Quand la taille de l'ensemble diminue, la fonction de localisation a une amplitude plus faible, et son extension horizontale diminue. Ceci peut être interprété simplement en considérant que le bruit d'échantillonnage est plus important pour des petits ensembles, et que son impact est plus dommageable à longue distance.

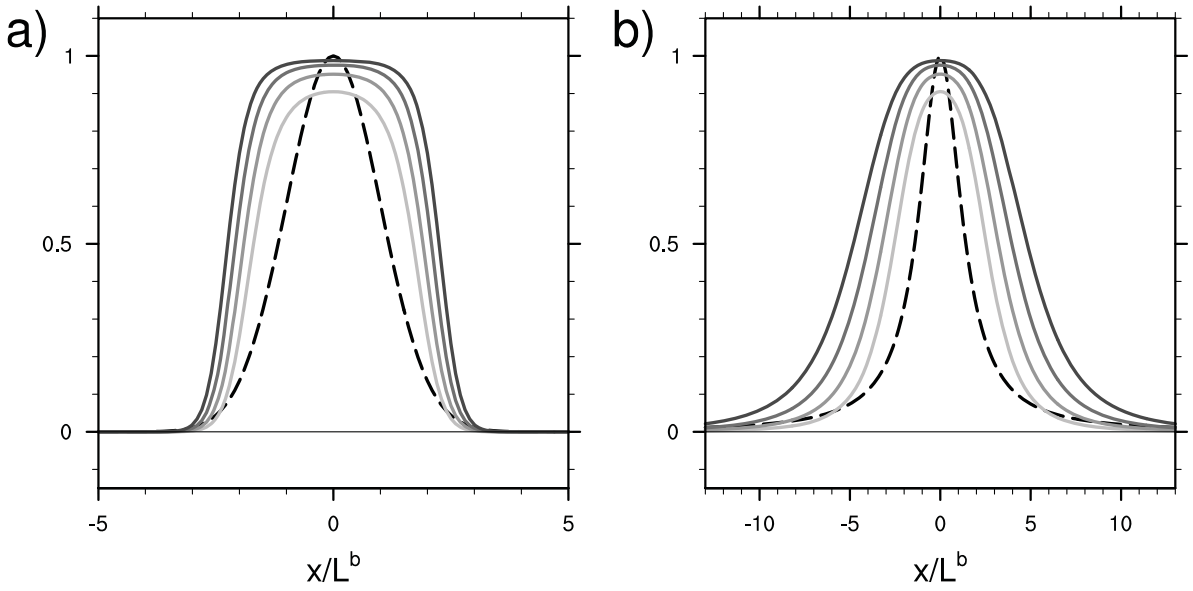


Figure 4.5. – Fonctions de corrélations gaussienne (a) et lorentzienne (b) (tireté), et fonctions de localisation correspondantes pour des ensembles de 20, 40, 80 et 160 membres (trait plein, gris clair à gris foncé), obtenu par la formule optimale 4.43.

Erreur de localisation

Il est possible de comparer la localisation donnée par l'équation 4.43 à la fonction à support compact donnée par l'équation 4.10 de Gaspari et Cohn (1999), qui est fréquemment utilisée dans la littérature (Hamill *et al.*, 2001; Lorenc, 2003). Pour mesurer l'efficacité d'une localisation $L(x,x')$ donnée, l'erreur quadratique moyenne de n'importe quelle covariance localisée peut être calculée par :

$$\begin{aligned} e(x,x') &= \mathbb{E}[(L(x,x')\widetilde{B}(x,x') - \widetilde{B}^{\star}(x,x'))^2] \\ &= (L(x,x')-1)^2\mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}(x,x')^2] + L(x,x')^2\mathbb{E}[\widetilde{B}^{e}(x,x')^2] \qquad (4.45) \\ &= \Big((L(x,x')-1)^2 + \frac{1}{N-1}L(x,x')^2\Big)\mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}(x,x')^2] \\ &\quad + \frac{1}{N-1}L(x,x')^2\mathbb{E}[\widetilde{v}^{\star}(x)\widetilde{v}^{\star}(x')] \qquad (4.46) \end{aligned}$$

Diagnostics de fonctions de localisation

Pour cette expérience, nous avons utilisé des variances asymptotiques de covariance gaussienne avec une amplitude $s = 2$, une portée $\mathcal{L}^v = 2\mathcal{L}^b$, et une taille d'ensemble de 80. La figure 4.6 montre que la fonction de Gaspari et Cohn (1999), même avec une longueur de localisation qui minimise l'erreur quadratique moyenne, est toujours moins performante que la localisation 4.43, puisque la différence de leurs erreurs quadratiques respectives est toujours positive.

On peut noter que dans notre cas, la fonction de localisation optimale a toujours un sommet plus plat que la fonction de Gaspari et Cohn (1999), suivi de pentes plus raides et de queues plus courtes. Ceci est cohérent avec les maxima de différence d'erreur quadratique moyenne, qui apparaissent de chaque côté des pentes raides. Ainsi, la fonction de Gaspari et Cohn (1999) semble bien adaptée pour la localisation dans des situations où la fonction de corrélation est piquée, mais pas si la fonction de corrélation a une forme gaussienne.

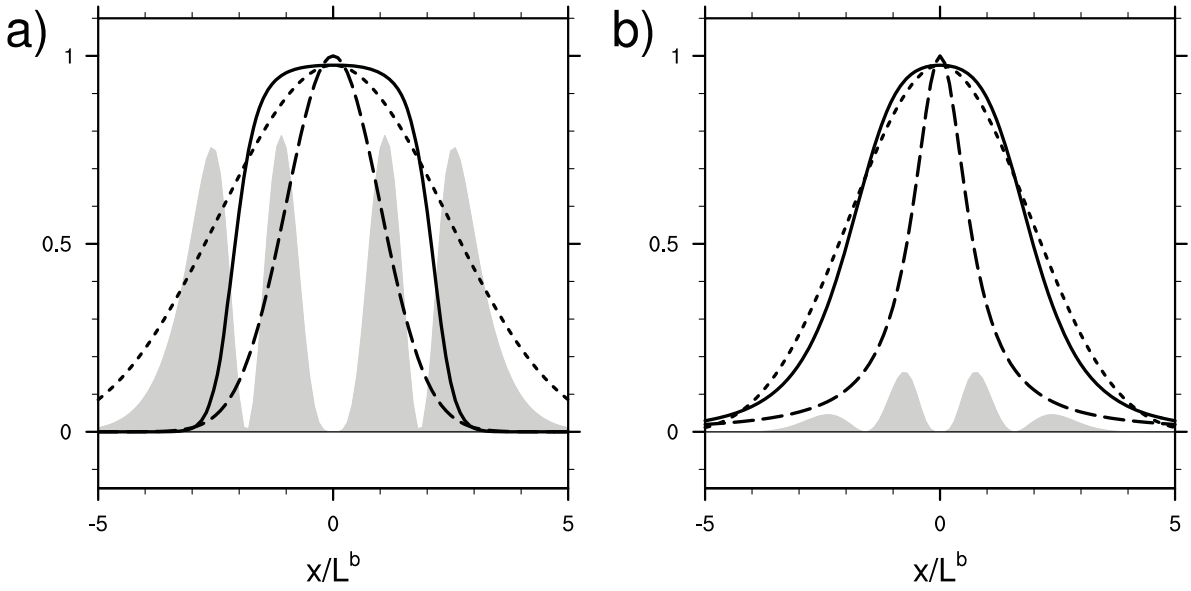


Figure 4.6. – Fonctions de corrélations gaussienne (a) et lorentzienne (b) (tireté), et fonctions de localisation correspondantes pour un ensemble de 80 membres, obtenues par la formule optimale 4.43 (trait plein) et par une fonction de Gaspari et Cohn (1999) optimisée (pointillés). La différence de leurs erreurs quadratiques moyennes, renormalisée par un facteur 100, est indiquée par la zone grisée.

Diagnostics de longueurs de localisation

Dans des situations non idéalisées, l'estimation pratique des fonctions de localisation n'est pas possible à partir de l'équation 4.43 qui fait intervenir des corrélations asymptotiques uniquement, seules les différentes expressions de la longueur de localisation sont exploitables (équations 4.21a, 4.21b et 4.21c). La figure 4.7 montre que dans notre cadre idéalisé, ces formulations sont presque équivalentes. Comme prévu, elles fournissent une bonne approximation de la fonction de localisation à courte distance, mais ont des queues plus courtes. Le bruit qui apparait à longue distance n'est pas vraiment un problème. En effet, comme on le montre dans le chapitre suivant, un ajustement de ces fonctions de localisation diagnostiquées par des fonctions définies positives, pour lesquelles le bruit d'échantillonnage à longue portée est amorti, est nécessaire avant une quelconque utilisation.

La forme des fonctions de localisation à courte distance peut être quantifiée par la longueur de localisation $\mathcal{L}^{\mathrm{L}}$. La figure 4.8 montre que les longueurs de localisation issues des équations 4.21a, 4.21b et 4.21c donnent des résultats similaires et sont très proches de la longueur de localisation théorique donnée par l'équation 4.44, particulièrement pour les ensembles de grande taille. La longueur de localisation calculée à partir du tenseur LCH (équation 4.34) montre aussi une bonne adéquation avec les autres estimations, comme le montre la figure 4.8. Comme prévu, la longueur de localisation diminue avec la taille de l'ensemble N.

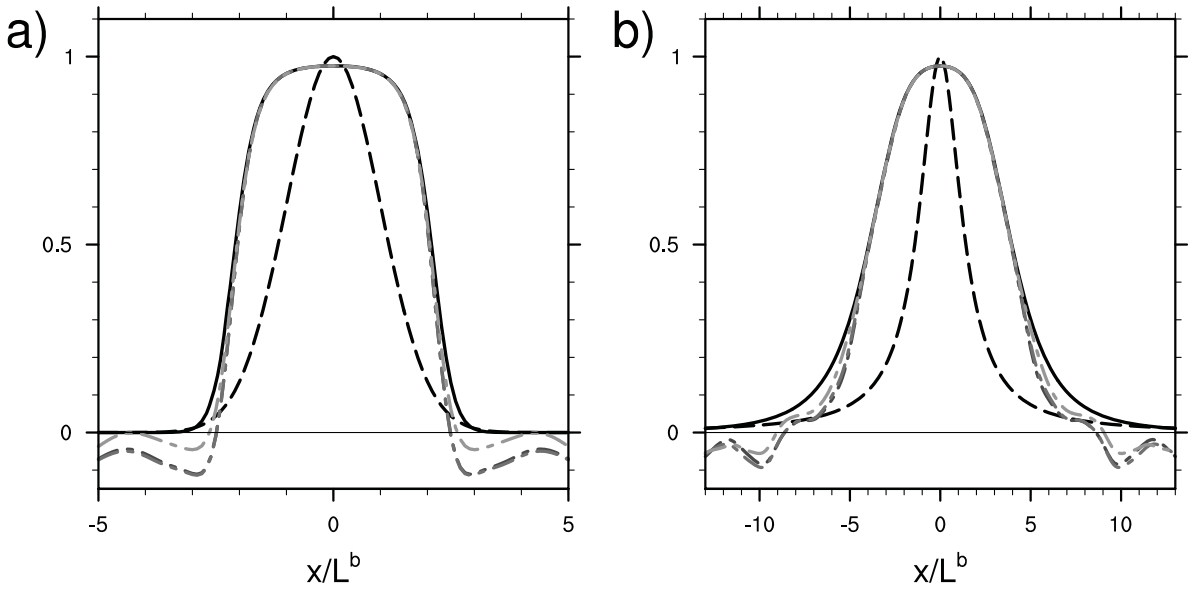


Figure 4.7. – Fonctions de corrélations gaussienne (a) et lorentzienne (b) (tireté), et fonctions de localisation correspondantes pour un ensemble de 80 membres, obtenues par la formule optimale 4.43 (trait plein noir) et par les équations 4.21a, 4.21b et 4.21c (tireté-pointillés, gris foncé à gris clair).

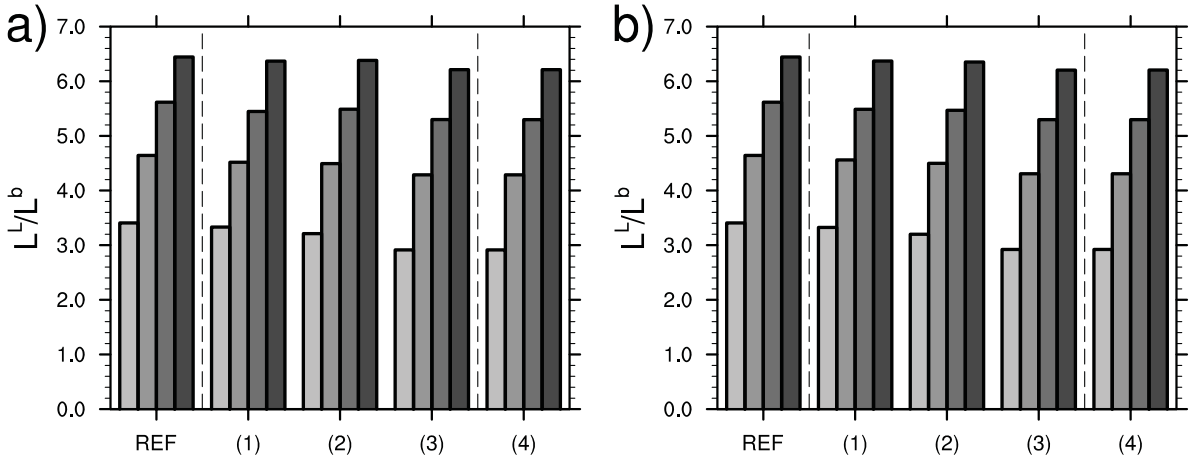


Figure 4.8. – Longueurs de localisation $\mathcal{L}^{\mathrm{L}}/\mathcal{L}^{b}$ pour des ensembles de 20, 40, 80 et 160 membres (histogrammes gris clair à gris foncé), calculées pour des fonctions de corrélation gaussienne (a) et lorentzienne (b), avec la formule optimale 4.44 (REF), diagnostiquées à partir des fonctions de localisation des équations 4.21a (1), 4.21b (2) et 4.21c (3), ou à partir de la longueur de portée estimée et de l'équation 4.34.

5 | Filtrage des covariances d'erreur d'ébauche à l'échelle convective

Ce chapitre reprend en les complétant les éléments de l'article Ménétrier, Montmerle, Michel et Berre (2014c), soumis à la revue Monthly Weather Review. En se basant sur l'assimilation d'ensemble décrite au chapitre 2, les applications développées au chapitre précédent sont testées dans un cadre plus réaliste, celui d'un modèle de prévision opérationnel à échelle convective. Les variances filtrées sont évaluées objectivement par rapport à une référence indépendante donnée par le grand ensemble. Des méthodologies pour filtrer les composantes du tenseur LCH sont présentées et évaluées. Les fonctions de localisation horizontale et verticale sont diagnostiquées pour les différentes variables du modèle.

Sommaire

5.1	**Filtrage des variances**	**91**
5.1.1	Filtrage spectral global	91
5.1.2	Méthodologie d'évaluation	94
5.1.3	Filtrage homogène et isotrope	95
5.1.4	Filtrage hétérogène	105
5.2	**Filtrage des tenseurs LCH**	**108**
5.2.1	Limitations du filtrage des longueurs de portée	108
5.2.2	Filtrage des composantes diagonales	109
5.2.3	Filtrage des composantes non diagonales	111
5.2.4	Impact du filtrage des tenseurs LCH	113
5.3	**Localisation des covariances**	**116**
5.3.1	Diagnostic des fonctions de localisation horizontale	116
5.3.2	Diagnostic des longueurs de localisation horizontale	117
5.3.3	Application de la localisation horizontale	118
5.3.4	Diagnostic des fonctions de localisation verticale	120

5.1. Filtrage des variances

De même que dans le chapitre précédent, les coefficients diagonaux des matrices $\widetilde{\mathbf{B}}^{\star}$, $\widetilde{\mathbf{B}}$ et $\widehat{\mathbf{B}}$ sont rassemblés en vecteurs de variances $\widetilde{\mathbf{v}}^{\star}$, $\widetilde{\mathbf{v}}$ et $\widehat{\mathbf{v}}$, pour simplifier les notations.
Il est à noter qu'en pratique, une troncature spectrale est appliquée aux membres de l'ensemble avant de calculer les variances dans l'espace physique, pour éviter les effets d'aliasing. Cette étape diminue d'un facteur deux la résolution spatiale des membres, passant ainsi de 2,5 à 5 km pour AROME.

5.1.1. Filtrage spectral global

Le filtrage spectral de Raynaud *et al.* (2009) a été développé pour l'assimilation d'ensemble afin de fournir des variances filtrées pour le modèle ARPEGE. Cette section discute de son adaptation au contexte de la prévision à échelle convective avec AROME.

Équivalence entre les filtres de Raynaud *et al.* (2009) et de Wiener (1949)

Le filtrage spatial objectif proposé et mis en œuvre par Raynaud *et al.* (2009) s'appuie sur le calcul dans l'espace spectral du ratio bruit sur signal de l'estimation. On se propose de montrer ici qu'il est équivalent à un filtre de Wiener (1949), couramment utilisé en traitement du signal.

Le filtrage spectral a lieu dans la base $\mathcal{B}_{\mathbf{s}}$, dans laquelle un nombre d'onde total entier $k^\star$ est attribué de façon surjective à chaque couple (k, l) de nombres d'onde horizontaux. Le filtre spectral $(\mathbf{F}_{\mathbf{s}}, \mathbf{f}_{\mathbf{s}})$ de Raynaud *et al.* (2009) suppose que l'erreur d'échantillonnage des variances est sans biais, et décorrélée des variances asymptotiques (cf. équation 3.40 et 3.41). Ses autres hypothèses sont les suivantes :

1. Le gain du filtre $\mathbf{F}_{\mathbf{s}}$ est diagonal à valeurs réelles, et les éléments diagonaux de même nombre d'onde total $k^\star$ ont la même valeur.
2. L'élément du gain du filtre $\mathbf{F}_{\mathbf{s}}$ de nombre d'onde total $k^\star = 0$ vaut 1.
3. L'offset $\mathbf{f}_{\mathbf{s}}$ est nul.

Si l'on transpose ces hypothèses dans l'espace physique (base $\mathcal{B}_{\mathbf{x}}$), on obtient respectivement que :

1. Le gain du filtre $\mathbf{F}_{\mathbf{x}}$ correspond à une convolution homogène et isotrope dans l'espace physique (cf. Berre (2000)).
2. La moyenne spatiale de l'estimation brute dans la base $\mathcal{B}_{\mathbf{x}}$ est conservée par le filtrage : $\mu(\widehat{\mathbf{v}}) = \mu(\widetilde{\mathbf{v}})$.
3. Excepté l'élément correspondant à $k^\star = 0$, les éléments de $(\mathbf{I} - \mathbf{F}_{\mathbf{s}})$ sont généralement non nuls, donc les variances asymptotiques dans l'espace spectral sont de biais nul, sauf l'élément correspondant à $k^\star = 0$ qui peut prendre n'importe quelle valeur. Dans la base $\mathcal{B}_{\mathbf{x}}$, cela signifie que l'espérance des variances asymptotiques $\widetilde{\mathbf{v}}^\star$ est homogène dans l'espace physique.

On retrouve donc exactement les hypothèses du filtre de Wiener (1949).

Détail de l'implémentation

Pour décrire en détail l'implémentation du filtre spectral de Raynaud *et al.* (2009), il faut au préalable définir :

— la transformée spectrale $\mathbf{P}$, permettant de passer de l'espace physique vers l'espace spectral,

— l'opérateur $\mathbf{S}_{\text{avg}}$, qui effectue des moyennes sur les éléments d'un vecteur complexe, en considérant à chaque fois tous les éléments de nombre d'onde (k, l) correspondant à ce $k^\star$ donné.

Les variances brutes sont calculées à partir des N membres de l'ensemble $\{\widetilde{\mathbf{x}}^b_p\}_{1 \leq p \leq N}$:

$$\widetilde{\mathbf{v}} = \frac{1}{N-1} \sum_{p=1}^{N} \left(\widetilde{\mathbf{x}}^b_p - \langle \widetilde{\mathbf{x}}^b \rangle \right) \circ \left(\widetilde{\mathbf{x}}^b_p - \langle \widetilde{\mathbf{x}}^b \rangle \right) \tag{5.1}$$

Le spectre de puissance des variances brutes $\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}}$ est ensuite estimé en utilisant le théorème de Wiener-Khinchin (Wiener, 1930; Khinchin, 1934), où l'espérance est remplacée par une moyenne $\mathbf{S}_{\text{avg}}$ sur une unique réalisation pour estimer la densité spectrale d'énergie des variances brutes :

$$\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}} = \mathbf{S}_{\text{avg}} \Big(\big| (\mathbf{P}\widetilde{\mathbf{v}}) \circ (\mathbf{P}\widetilde{\mathbf{v}}) \big| \Big) \tag{5.2}$$

Le spectre de puissance de l'erreur d'échantillonnage des variances brutes $\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}^e}$ est estimé en supposant que la distribution des membres est gaussienne, et en prenant pour matrice de covariance asymptotique une matrice statique, homogène et isotrope $\overline{\mathbf{B}}$:

$$\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}^e} = \frac{2}{N-1}\mathbf{P}(\overline{\mathbf{B}} \circ \overline{\mathbf{B}})\mathbf{P}^{\mathrm{T}} \tag{5.3}$$

Le filtre brut $\widetilde{\mathbf{F}}_s$ est calculé par l'équation 3.45a, en supposant que :

$$\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{v}}^\star) \simeq \mathbf{P}^{-1}(\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}} - \mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}^e})\mathbf{P} \tag{5.4a}$$

$$\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{v}}^e) \simeq \mathbf{P}^{-1}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}^e}\mathbf{P} \tag{5.4b}$$

ce qui donne :

$$\widetilde{\mathbf{F}}_s = (\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}} - \mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}^e})\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}}^{-1} \tag{5.5}$$

Cependant, en raison des erreurs d'estimation de $\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}}$ et $\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}^e}$, il n'est pas garanti que l'estimation 5.4a soit définie positive. En conséquence, les coefficients diagonaux du filtre $\widetilde{\mathbf{F}}_s$ ne sont pas tous positifs. Pour pallier cette faiblesse, tous les coefficients $\widetilde{\mathbf{F}}_s(k^\star)$ avec $k^\star \geq k_c^\star$ sont mis à zéro, où $k_c^\star$ est le plus petit nombre d'onde pour lequel $\widetilde{\mathbf{F}}_s(k_c^\star) < 0$.

L'utilisation d'une seule réalisation pour estimer la densité spectrale d'énergie des variances brutes (équation 5.2) n'est pas très robuste pour les petits nombres d'onde, puisque la moyenne $\mathbf{S}_{\mathrm{avg}}$ ne concerne alors que très peu de couples (k, l). Une possibilité est d'ajuster le spectre vers une forme prédéfinie (et donc paramétrique). Dans Raynaud *et al.* (2009), le filtre final est de la forme :

$$\mathbf{F}_s(k^\star) = \cos\left(\frac{\pi \min(k^\star, N_{\mathrm{trunc}})}{2N_{\mathrm{trunc}}}\right)^2 \tag{5.6}$$

où N_{trunc} est ajusté de sorte que la longueur de filtrage $\mathcal{L}^f$ de $\mathbf{F}_s$ soit égale à celle de $\widetilde{\mathbf{F}}_s$. Cette longueur de filtrage est définie à l'instar de la longueur de corrélation dans Daley (1991), détaillée dans l'annexe A.1.1.

Enfin, un test est effectué après le filtrage pour corriger les variances négatives vers une valeur constante, mais positive (égale ici à la plus petite variance positive avant le test).

Dans son usage opérationnel à Météo-France pour le modèle ARPEGE, le filtre de Raynaud *et al.* (2009) a été calibré à partir d'un échantillon climatologique important, pour le rendre statique. Cette démarche se justifie pour un modèle global où tous les types de temps sont représentés. Pour un modèle régional à aire limitée, en revanche, la variabilité temporelle des champs à filtrer est beaucoup plus importante, ce qui rend délicate l'utilisation d'un filtre climatologique.

Stratégie pour un modèle à aire limitée

La variabilité temporelle des covariances d'erreur d'ébauche est importante pour un modèle à échelle convective et à aire limitée comme AROME (Brousseau *et al.*, 2012). Il serait donc préférable de rendre l'estimation de $\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{v}}^e}$ dans l'équation 5.3 plus dépendante de l'écoulement en remplaçant la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ homogène, isotrope et climatologique par une matrice $\overline{\overline{\mathbf{B}}}$ homogène, isotrope, mais calculée à partir d'un ensemble quotidien. Cette approche sous-entend toutefois qu'un nombre suffisant de membres soit produit pour calibrer une telle matrice.

Si les variances brutes présentent de forts gradients et que la fonction de filtrage comporte des lobes négatifs, alors il y a un risque pour que certaines variances filtrées soient négatives. Or, la présence de forts gradients dans les variances d'AROME a été démontrée au chapitre 2. Dans la suite de cette thèse, le filtrage spectral de Raynaud *et al.* (2009) a donc été adapté au contexte de l'échelle convective en conservant le filtre brut, puis en appliquant le test permettant d'assurer la positivité des variances filtrées.

5.1.2. Méthodologie d'évaluation

Outils d'évaluation

En supposant que l'on possède une référence $\widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}}$ pour évaluer les variances $\widetilde{\mathbf{v}}$, il est possible de calculer les diagnostics suivants :

— la racine de l'erreur quadratique moyenne :

$$\mathrm{RMSE}(\widetilde{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}}) = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\widetilde{v}_i - \widetilde{v}_i^{\mathrm{ref}})^2} \tag{5.7}$$

— l'erreur relative en valeur absolue :

$$\mathrm{RAE}(\widetilde{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}}) = \frac{1/n\sum_{i=1}^{n}|\widetilde{v}_i - \widetilde{v}_i^{\mathrm{ref}}|}{\mu^{\mathrm{s}}(\widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}})} \tag{5.8}$$

où μ^{s} est la moyenne spatiale :

$$\mu^{\mathrm{s}}(\widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\widetilde{v}_i^{\mathrm{ref}} \tag{5.9}$$

— la corrélation spatiale définie par l'équation 2.8,

— le ratio de dispersion spatiale :

$$\mathrm{SR}(\widetilde{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}}) = \frac{\sigma(\widetilde{\mathbf{v}})}{\sigma(\widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}})} \tag{5.10}$$

où σ est la dispersion spatiale définie par l'équation 2.9.

Caractéristiques et incertitude de la référence

Pour évaluer les algorithmes de filtrage, le grand ensemble décrit au chapitre 2 est séparé en deux sous-ensembles indépendants : un sous-ensemble de test de taille N et un sous-ensemble de référence de taille N_{ref}. Naturellement, cette référence n'est pas parfaite, mais son incertitude peut être estimée. En supposant que la distribution de l'ensemble est gaussienne, les variances de l'erreur d'échantillonnage pour les deux sous-ensembles sont déduites de l'équation 3.70 :

$$\mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i^{e})^2\big] = \frac{2}{N-1}\mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i^{\star})^2\big] \tag{5.11a}$$

$$\mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i^{\mathrm{ref},e})^2\big] = \frac{2}{N_{\mathrm{ref}}-1}\mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i^{\star})^2\big] \tag{5.11b}$$

d'où le ratio des variances d'erreur d'échantillonnage :

$$r^e = \frac{\mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i^e)^2\big]}{\mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i^{\mathrm{ref},e})^2\big]} = \frac{N_{\mathrm{ref}} - 1}{N - 1} \tag{5.12}$$

Dans les expériences, on utilise des sous-ensembles de test de 6 et 12 membres pour étudier l'impact de la taille de l'échantillon. Ceci permet au sous-ensemble restant de 78 membres de fournir une référence pour les variances $\widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}}$, puisque le bruit d'échantillonnage associé est significativement plus petit. Dans ce cas, le filtrage des variances est moins essentiel. Pour ces deux cas de figure, le ratio des écarts-types $\sqrt{r^e}$ est respectivement égal à 3,92 et 2,65 pour les sous-ensembles de 6 et 12 membres.
Comme les sous-ensembles de test et de référence sont indépendants, on peut considérer que leurs erreurs d'échantillonnage respectives dans le calcul des variances sont décorrélées. En utilisant la définition de r^e, on obtient :

$$\mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i - \widetilde{v}_i^{\mathrm{ref}})^2\big] = \mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i^e)^2\big] + \mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i^{\mathrm{ref},e})^2\big] = (1 + r^e)\mathbb{E}\big[(\widetilde{v}_i^{\mathrm{ref},e})^2\big] \tag{5.13}$$

Sous une hypothèse d'ergodicité spatiale, les espérances peuvent être remplacées par des moyennes spatiales :

$$\mu^{\mathrm{s}}\big((\widetilde{\mathbf{v}} - \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}}) \circ (\widetilde{\mathbf{v}} - \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}})\big) = \frac{1}{1 + r^e}\ \mu^{\mathrm{s}}\big(\widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref},e} \circ \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref},e}\big) \tag{5.14}$$

où "$\circ$" est le produit de Schur. Ainsi, l'incertitude de la référence peut être estimée comme une fonction de la RMSE :

$$\sqrt{\mu^{\mathrm{s}}\big(\widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref},e} \circ \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref},e}\big)} = \sqrt{\frac{N - 1}{N + N_{\mathrm{ref}} - 2}}\ \mathrm{RMSE}(\widetilde{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}}) \tag{5.15}$$

Cette incertitude est indiquée dans les figures représentant la RMSE, par une aire grisée.

Variances de variables non balancées

Comme il est rappelé section 4.1.1, une utilisation possible des variances filtrées issues d'un ensemble est d'apporter de la dépendance à l'écoulement dans un modèle climatologique de $\mathbf{B}$. Ceci peut être fait en remplaçant les variances d'erreur d'ébauche climatologiques des variables non balancées par les variances filtrées dans les matrices d'autocorrélation de $\overline{\mathbf{B}}_s$, c'est-à-dire après l'application de $\overline{\mathbf{K}}_p^{-1}$ aux variables totales (cf. section 1.3.3). Bien que général, le formalisme développé dans la section 4.1 est appliqué ici spécifiquement aux variances de ces variables non balancées. En effet, comme nous le verrons au chapitre 6, l'un des objectifs de cette thèse est de tester leur inclusion dans la matrice $\overline{\mathbf{B}}_s$ de AROME.

5.1.3. Filtrage homogène et isotrope

Dans le reste de ce chapitre, et à défaut d'indication contraire, les cartes correspondent aux prévisions issues de l'analyse du 3 novembre 2011 à 18 h UTC, et les scores sont moyennés sur les 4 cycles utilisables du grand ensemble, du 3 novembre 2011 à 18 h UTC et le 4 novembre 2011 à 3 h UTC.

Algorithmes de filtrage testés

Les algorithmes de filtrage développés dans la section 4.1 sont basés sur un processus itératif d'ajustement progressif de la longueur de filtrage. Une valeur initiale de cette longueur est sélectionnée, puis le filtre - dont la forme est choisie arbitrairement - est appliqué aux variances brutes $\widetilde{\mathbf{v}}$, afin d'obtenir les variances filtrées $\widehat{\mathbf{v}}$. Ces variances sont utilisées pour calculer un critère spécifique, dont le but est de déterminer si la longueur de filtrage sélectionnée initialement est trop courte ou trop longue. Une fois la longueur de filtrage mise à jour, le processus recommence. On a démontré dans le chapitre précédent que les critères 4.7 et 4.9 permettait cette estimation itérative de la longueur de filtrage.
Ces filtres itératifs sont comparés à deux autres approches possibles. La première est basée sur un ajustement de la longueur de filtrage (pour une forme de noyau donnée) telle que la RMSE des variances filtrées par rapport aux variances de référence à 78 membres soit minimisée. En pratique, cet ajustement est obtenu en utilisant un algorithme classique de recherche linéaire (méthode de Brent). Cette première méthode alternative sera considérée comme une méthode optimale, dans le sens où elle permet de trouver la meilleure longueur de filtrage possible une fois que le noyau du filtre et les variances de référence sont connus. La deuxième méthode alternative utilise notre implémentation du filtre adapté de Raynaud *et al.* (2009), adapté à l'échelle convective dans la section 5.1.1.

Choix du noyau de la fonction de filtrage

Dans les algorithmes itératifs, la forme de la fonction de filtrage est choisie arbitrairement avant d'en optimiser la longueur. La première question à se poser est donc celle de l'influence du noyau choisi sur la qualité du filtrage. Dans cette optique, la longueur de filtrage de plusieurs formes de noyau est ajustée pour minimiser la RMSE entre les variances filtrées et les variances de référence. Ceci permet de trouver la meilleure longueur de filtrage possible pour chaque forme de filtre en connaissant les variances de référence, et d'effectuer ainsi une évaluation objective des différentes formes de filtres.

Trois types de noyau appliqués dans l'espace spectral sont testés : gaussienne, exponentielle décroissante et lorentzienne. Dans l'espace physique, un filtre récursif d'ordre 1, décrit dans Purser *et al.* (2003a), est aussi évalué. Les résultats quantifiés par la RMSE sont représentés dans la figure 5.1, et montrent que tous les filtres ont, en moyenne, quasiment les mêmes performances, quelle que soit leur forme, pour toutes les variables et pour des ensembles de 6 ou 12 membres. Dans tous les cas, le filtrage apporte une amélioration significative de la RMSE par rapport aux variances brutes. La figure 5.2 montre que cette amélioration, mesurée par la RAE, se situe entre 10 et 50%. Comme prévu, l'amélioration est plus importante pour un petit ensemble, ce qui est cohérent avec les conclusions analytiques de la figure 4.3, et pour des variables de petite échelle comme la vorticité. Un autre point intéressant concernant les variances de vorticité calculées avec 6 membres : les performances relatives des variances brutes et moyennées horizontalement sont inversées entre RMSE et RAE (graphes a) des figures 5.1 et 5.2 respectivement). Ceci signifie que pour de petits ensembles, une part significative de la RMSE vient de valeurs extrêmes, plutôt que de structures de grande échelle mal positionnées. Ce n'est pas le cas pour des champs de variances de plus grande échelle ou pour des ensembles de plus grande taille.

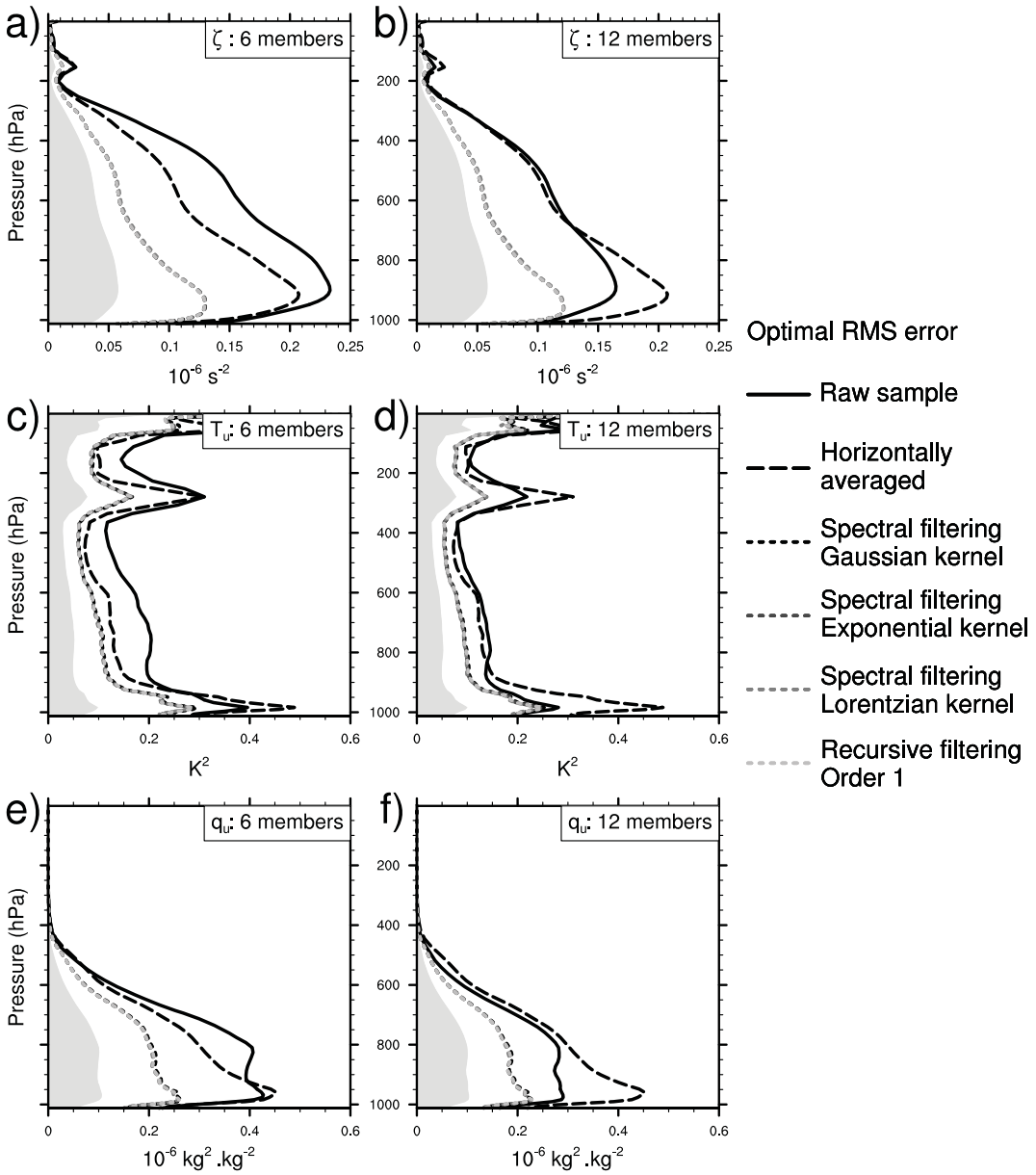


Figure 5.1. – RMSE des variances d'erreur d'ébauche de vorticité (a et b), de température non balancée (c et d), et d'humidité spécifique non balancée (e et f), pour des ensembles de 6 (a, c et e) ou 12 membres (b, d et f). La référence est calculée à partir d'un ensemble indépendant de 78 membres, son incertitude (équation 5.15) étant illustrée par la zone grisée. Les configurations testées sont : variances brutes (trait plein noir), moyennées horizontalement (tiretés noirs), et filtrées par diverses fonctions de filtrages optimisées pour minimiser la RMSE en connaissant la référence (pointillés).

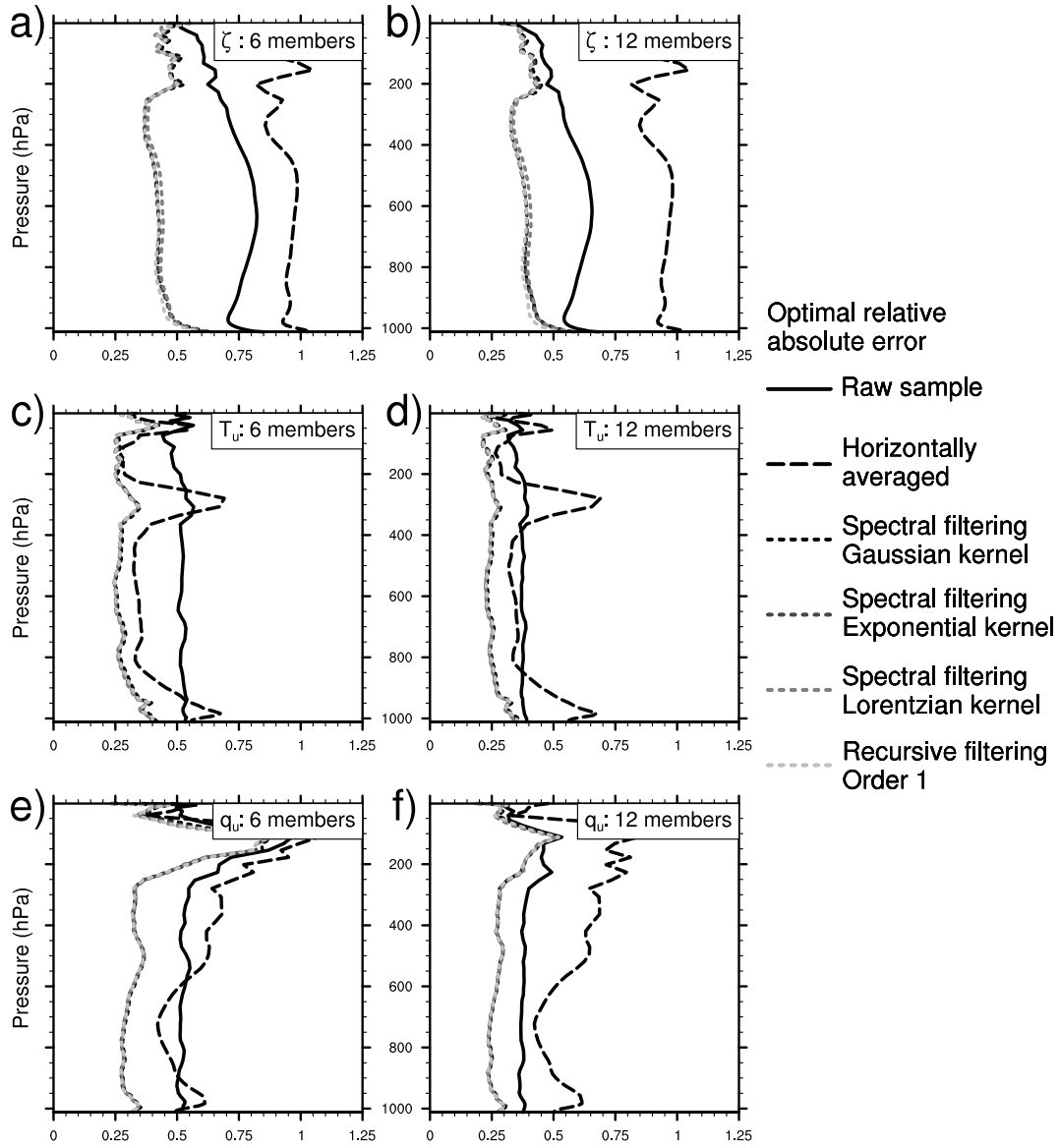


Figure 5.2. – Comme la figure 5.1 pour l'erreur relative en valeur absolue (RAE).

Performance du filtrage

La seconde question concerne la capacité des critères 4.7 et 4.9 à fournir une bonne approximation de la longueur de filtrage optimale. Pour un filtre de forme gaussienne, la figure 5.3 suggère que le critère général 4.7 donne toujours des variances filtrées quasi optimales précises. Le critère 4.9, basé sur l'hypothèse que la distribution de l'ensemble est gaussienne, fonctionne bien pour T_u et q_u, mais il est moins précis pour ζ (rangée du haut de la figure 5.3) et η_u (pas d'illustration). Ce résultat montre que la prise en compte de la non-gaussianité est particulièrement importante pour les variables ζ et η_u à l'échelle convective. À l'échelle synoptique, c'est souvent pour l'humidité spécifique que l'hypothèse gaussienne est la plus critiquable (Dee et da Silva, 2003; Hólm *et al.*, 2002). Cependant, des études récentes (R. Legrand, communication personnelle) indiquent qu'à l'échelle convective la vorticité et la divergence ont des distributions significativement non-gaussienne, ce qui est cohérent avec notre résultat.

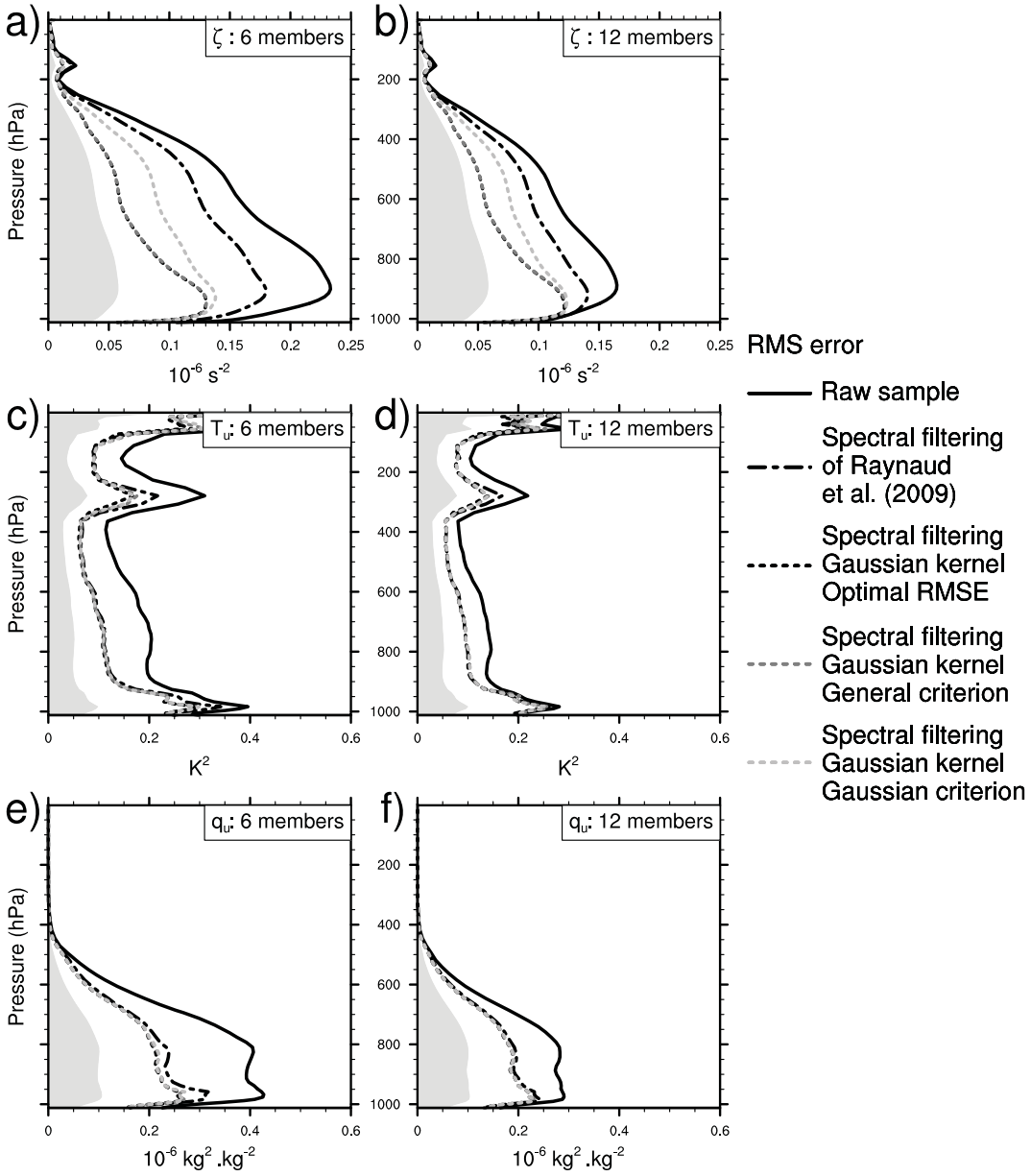


Figure 5.3. – Comme la figure 5.1, mais pour d'autres configurations testées : filtrage spectral adapté de Raynaud *et al.* (2009) (tiretés/pointillés noirs) et filtrage par un noyau gaussien, dont la longueur de filtrage est calculée pour minimiser la RMSE en connaissant la référence (pointillés sombres), pour vérifier le critère général 4.7 (pointillés moyens), ou pour vérifier le critère gaussien 4.9 (pointillés clairs).

Les conclusions obtenues pour un filtre de forme gaussienne sont exactement similaires pour d'autres formes de filtres, de même que pour les filtres récursifs : le critère général 4.7 est le plus efficace pour optimiser la longueur de filtrage.

Pour des variables d'échelle relativement grande comme la température et l'humidité, et en comparaison avec le filtre optimisé basé sur l'ensemble de référence à 78 membres, le filtre de Raynaud *et al.* (2009) modifié fournit des variances filtrées proches de l'optimalité, de façon similaire aux filtres itératifs (bien que de légères sous-optimalités soient visibles pour q_u avec 6 membres). Néanmoins, dans le cas de la vorticité, la RMSE est nettement plus importante

que celle des filtres itératifs. Bien que cela n'ait pas été étudié en détail, il est probable que cela soit lié à un comportement spécifique de la vorticité, pour lequel les approximations dans l'estimation du filtre spectral sont plus sensibles.

Comportement des variances filtrées

Pour obtenir une meilleure compréhension des effets sur les variances du filtrage spatial par un filtre gaussien optimisé grâce au critère général 4.7, la figure 5.4 propose un diagramme de Taylor représentant certaines propriétés des variances brutes et filtrées. Dans ce diagramme, la coordonnée radiale est le ratio de dispersion spatiale (respectivement $\mathrm{SR}(\widetilde{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}})$ et $\mathrm{SR}(\widehat{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}})$) et la coordonnée angulaire représente la corrélation spatiale (respectivement $\mathrm{cor}(\widetilde{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}})$ et $\mathrm{cor}(\widehat{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}})$). Chaque niveau du sol jusqu'à 200 hPa est représenté. Pour obtenir une impression plus visuelle des effets du filtrage, des cartes de variances brutes et filtrées sont tracées dans la figure 5.5 pour q_u en basse couche, les variances étant calculées avec différentes tailles d'ensemble. Plusieurs conclusions peuvent être tirées de ces diagrammes :

- Pour toutes les variables, une augmentation de la taille de l'ensemble améliore à la fois le ratio de dispersion spatiale et la corrélation spatiale des variances brutes, en direction du point de référence caractérisé par des valeurs de 1 (indiqué par REF sur le diagramme). Ceci est cohérent avec la première ligne de la figure 5.5, montrant une diminution du bruit d'échantillonnage quand la taille de l'ensemble augmente.
- Le filtrage homogène et isotrope améliore la corrélation spatiale, mais dans une moindre mesure pour les ensembles de grande taille, ce qui signifie que la plupart des structures spatiales sont déjà bien représentées pour ceux-ci.
- Le ratio de dispersion spatiale est toujours fortement réduit au cours du filtrage, jusqu'à des valeurs inférieures à 1, ce qui signifie que la dispersion des variances filtrées est inférieure à celle des variances de référence. Ceci n'est pas vraiment un problème, en considérant que les variances de référence, non filtrées, incluent du bruit d'échantillonnage qui augmente artificiellement leur dispersion, et qu'un léger sur-filtrage des variances semble plus acceptable qu'un sous-filtrage pour les applications en prévision numérique du temps.
- La précision des variances filtrées issues du sous-ensemble à 12 membres est légèrement meilleure que pour leurs contreparties du sous-ensemble à 6 membres, caractérisée par un déplacement des points correspondants en direction du point REF. Ceci est cohérent avec une propriété intéressante de notre méthode de filtrage, déjà remarquée et discutée dans la section 4.3, que l'on peut constater sur les cartes du bas de la figure 5.5 : plus l'ensemble est de grande taille, plus le filtrage est doux, et plus les structures restantes sont de fine échelle.

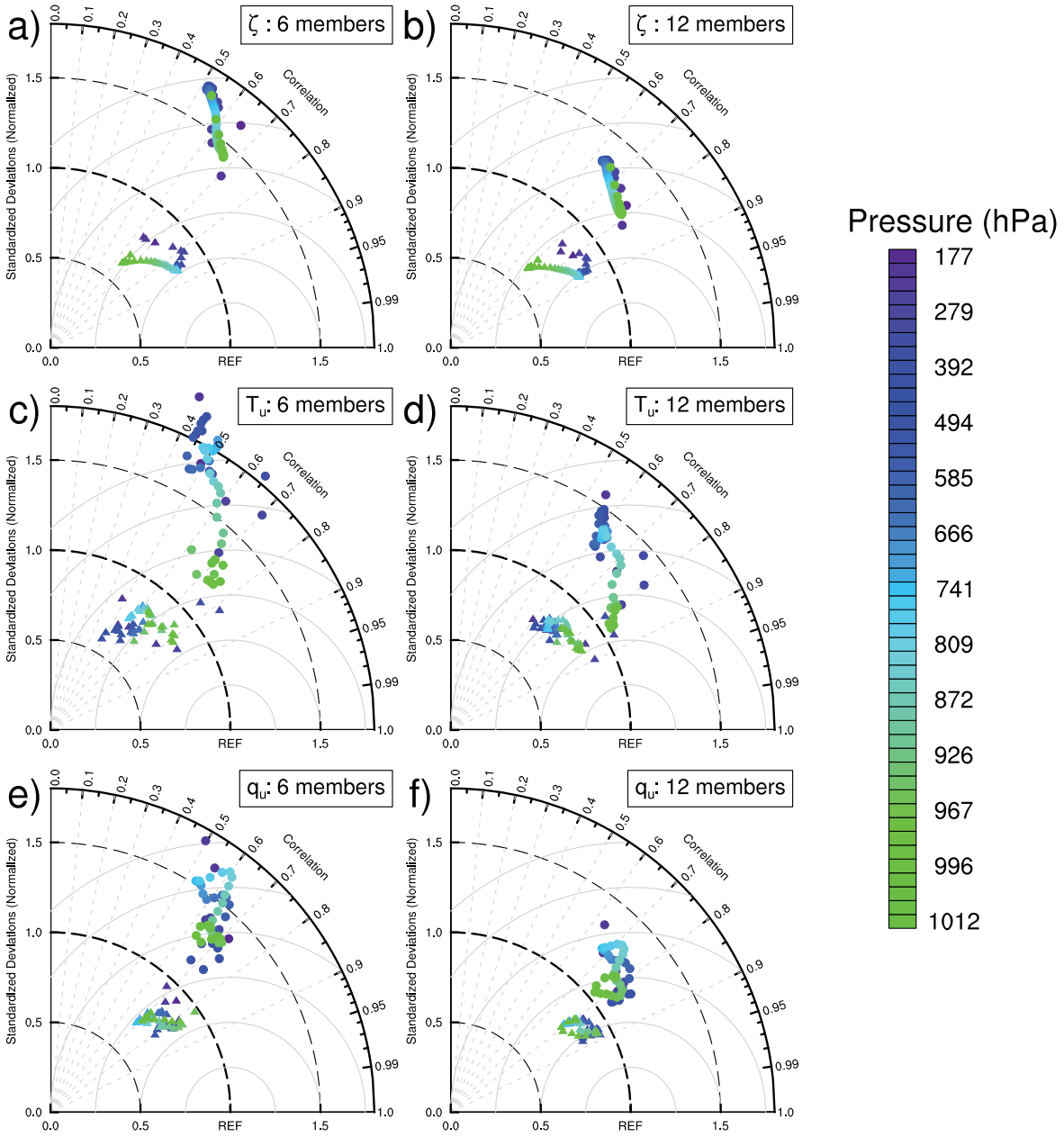


Figure 5.4. – Diagrammes de Taylor représentant la corrélation et le ratio de dispersion spatiale des variances d'erreur d'ébauche brutes (cercles) et filtrées (triangles), pour la vorticité (a et b), la température non balancée (c et d), et l'humidité spécifique non balancée (e et f), pour des ensembles de 6 (a, c et e) ou 12 membres (b, d et f). La référence est calculée à partir d'un ensemble indépendant de 78 membres. Les couleurs indiquent le niveau de pression moyen.

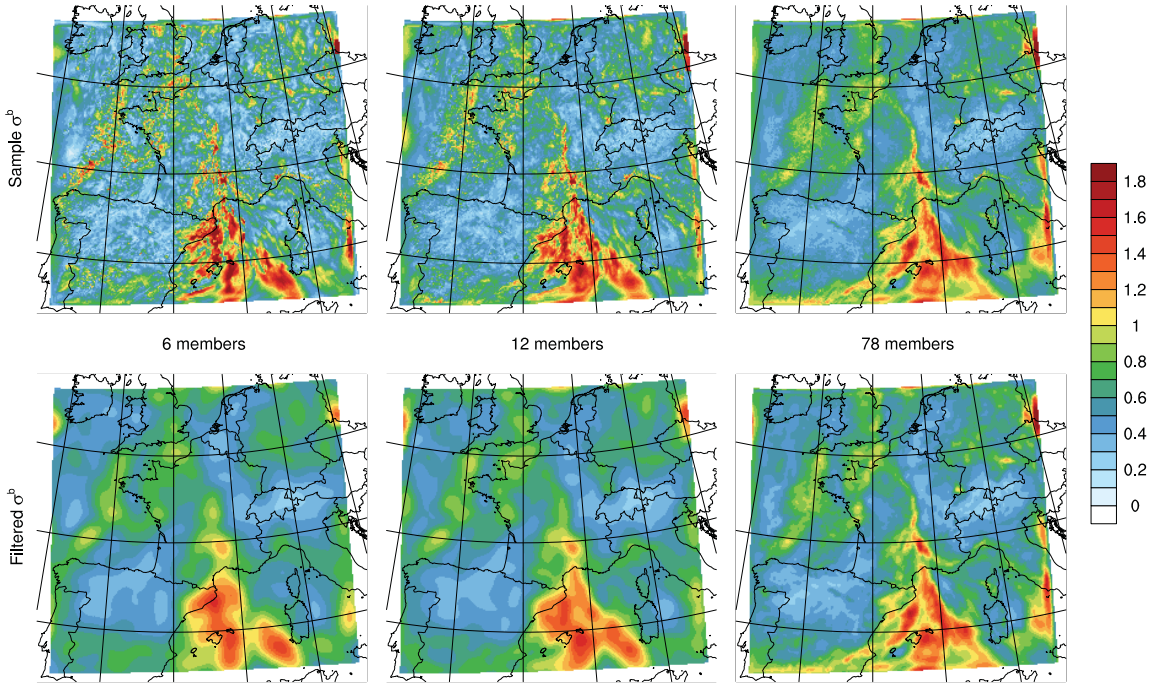


Figure 5.5. – Ecarts-types d'erreur d'ébauche d'humidité spécifique non balancée au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa), bruts (en haut) et filtrés (critère général 4.7, en bas), pour des ensembles de taille croissante : 6, 12 et 78 membres, de gauche à droite (unité : g.kg^{-1}).

Comportement de la longueur de filtrage

La figure 5.6 montre la troncature spectrale du filtrage des variances, qui est inversement proportionnelle à la longueur de filtrage. Là aussi, comme les résultats obtenus pour η_u sont comparables à ceux obtenus pour ζ, seules les figures pour ζ sont discutées. Comme déjà noté, les longueurs de filtrage sont plus courtes pour de grands ensembles, ainsi que pour des champs de petite échelle tels que ζ. Concernant la variabilité verticale, on peut noter que la longueur de filtrage augmente dans la troposphère pour ζ et pour T_u, mais qu'elle reste quasiment constante pour q_u.

Les longueurs de filtrage provenant de trois configurations différentes sont cohérentes avec les résultats de la figure 5.3. Le critère 4.7 fournit une longueur de filtrage quasi optimale, avec une légère tendance au sur-filtrage (déjà notée au chapitre précédent, figure 4.4). Le critère gaussien 4.9 reste précis pour T_u et q_u, mais donne une longueur de filtrage beaucoup trop courte pour ζ. La figure 5.7 montre des exemples de champs d'écarts-types déduits des variances pour un ensemble de 6 membres, filtrées par le filtre adapté d'après Raynaud *et al.* (2009), ou par des filtres gaussiens optimisés suivant les critères 4.7 et 4.9. Comme prévu, le critère général 4.7 fournit des variances filtrées plus lisses que le critère gaussien, le filtre modifié de Raynaud *et al.* (2009) étant le moins intense.

Finalement, il est à noter que la variabilité des longueurs de filtrage entre les différents réseaux d'assimilation est faible, ce qui signifie que les critères d'optimalité donnent des résultats robustes (cf. chapitre 6). Pour une période de temps plus longue, une variabilité quotidienne des longueurs de filtrage est cependant observée, en cohérence avec la variabilité de l'erreur d'ébauche documentée par exemple dans Brousseau *et al.* (2012).

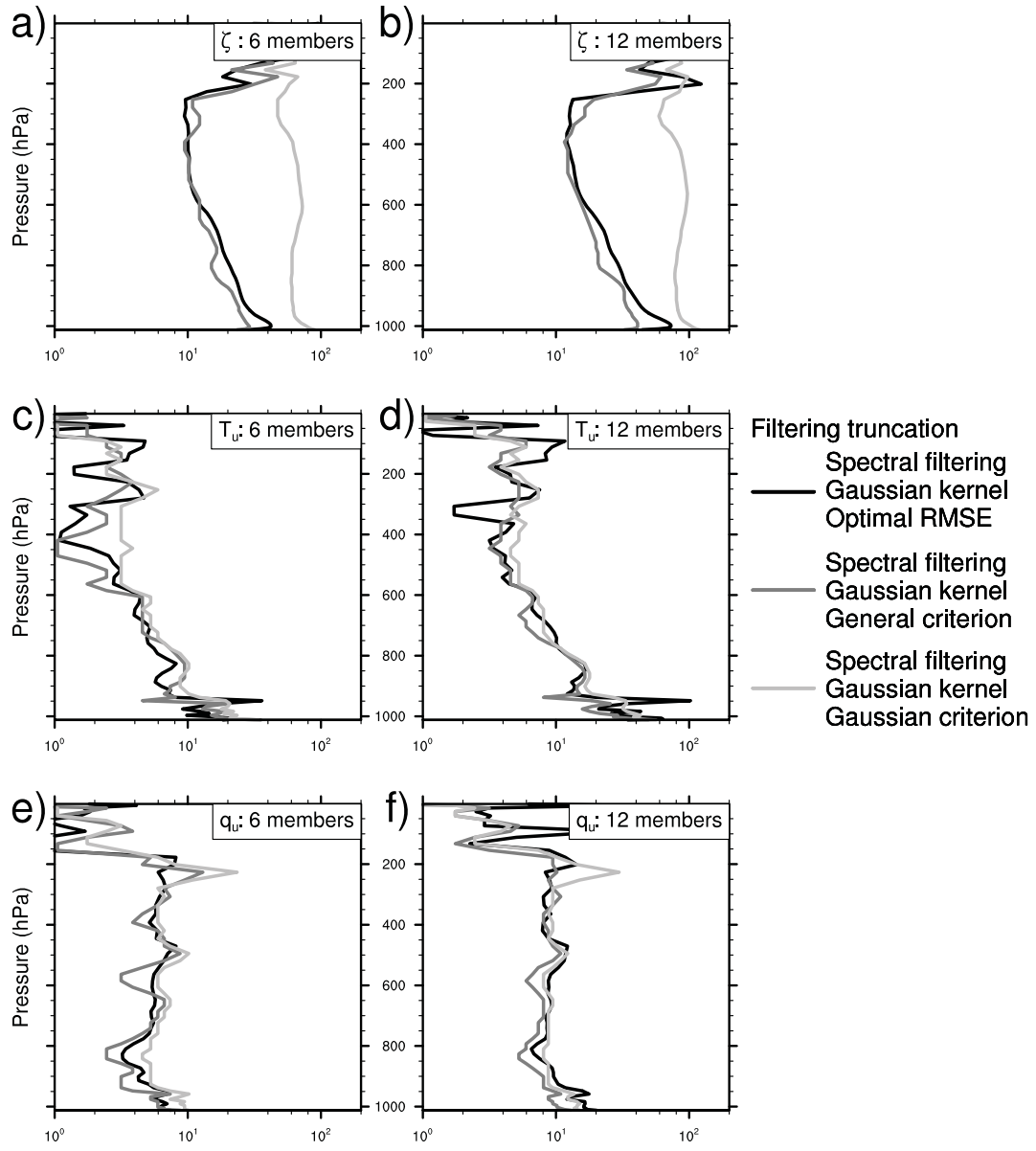


Figure 5.6. – Troncatures spectrales du filtrage calculées pour minimiser la RMSE en connaissant la référence (trait plein sombre), pour vérifier le critère général 4.7 (trait plein moyen), ou pour vérifier le critère gaussien 4.9 (trait plein clair), pour les variances d'erreur d'ébauche de vorticité (a et b), de température non balancée (c et d), et d'humidité spécifique non balancée (e et f), pour des ensembles de 6 (a, c et e) ou 12 membres (b, d et f). Les résultats sont donnés pour des prévisions issues du 3 novembre 2011 à 18 h UTC seulement.

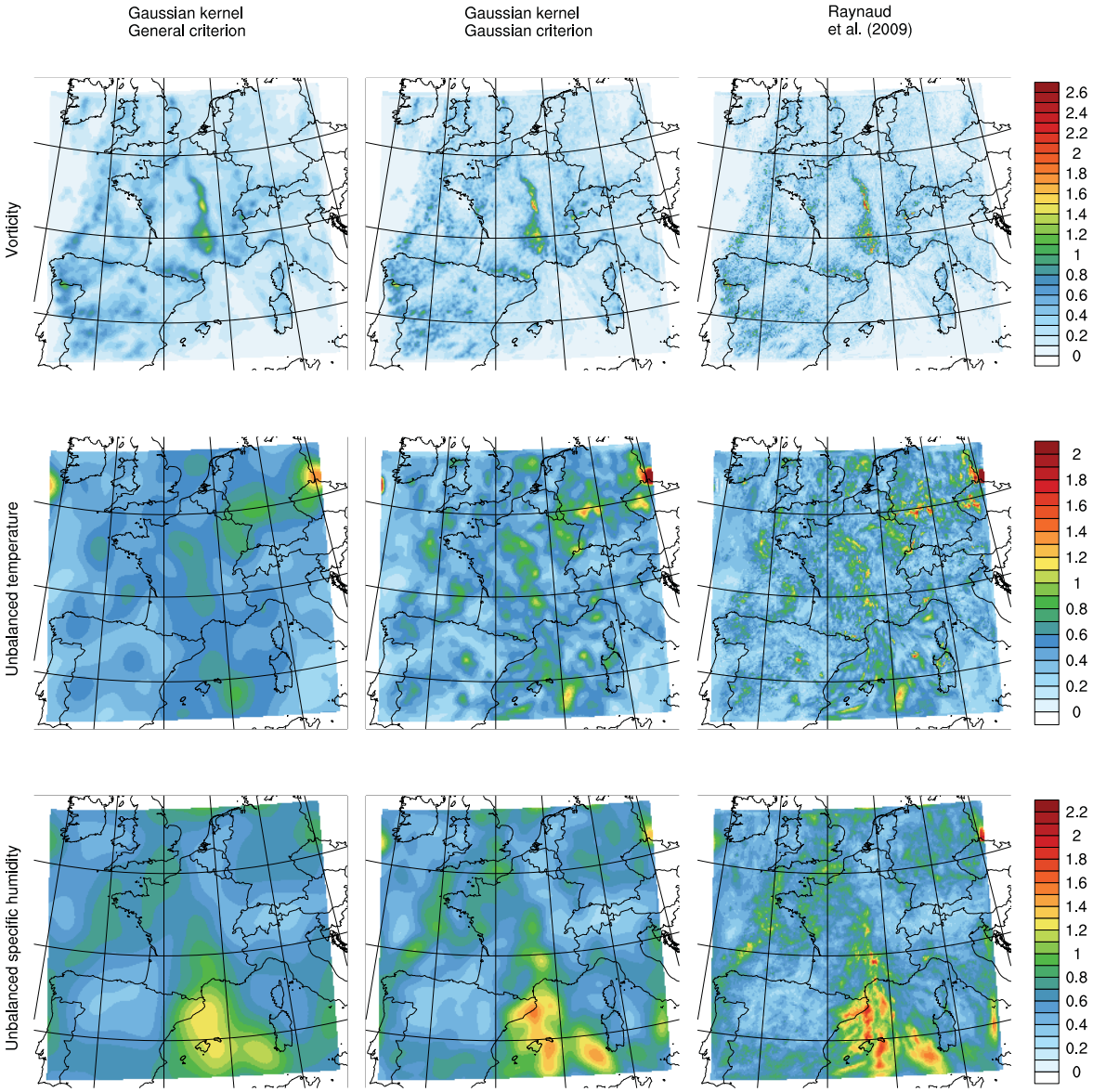


Figure 5.7. – Ecarts-types filtrés d'erreur d'ébauche de vorticité (en haut, 10^{-3} s^{-1}), température non balancée (au milieu, K) et d'humidité spécifique non balancée (en bas, g.kg^{-}1) au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa) pour trois types de filtres. De gauche à droite : filtre adapté de Raynaud *et al.* (2009) et filtres gaussiens optimisés par le critère général 4.7 ou par le critère gaussien 4.9.

5.1.4. Filtrage hétérogène

Pour des données réelles, et comme on l'a montré dans la section 2.2, l'hypothèse d'homogénéité horizontale des propriétés statistiques des variances brutes n'est pas valide. Plusieurs sources d'hétérogénéité peuvent être listées : la dynamique (ex. : zones convectives et stratiformes), la topographie, le réseau d'observation (ex. : contraste terre/mer), les effets des champs coupleurs au bord du domaine à aire limitée, etc. Ainsi, le filtrage des variances brutes devrait idéalement être hétérogène et anisotrope pour atteindre l'optimalité.

Méthode des masques géographiques

Une extension hétérogène de notre méthode de filtrage est possible en optimisant indépendamment le(s) critère(s) d'optimalité sur des sous-domaines distincts. Cela revient à remplacer les espérances par des moyennes locales plutôt que globales, et donc à adopter une hypothèse d'ergodicité moins restrictive. Un algorithme empirique est ici retenu pour reconstruire un champ de variances filtrées qui soit continu : on applique un lissage de petite échelle aux frontières des sous-domaines, avec ici une longueur caractéristique de l'ordre de 5 fois la résolution spatiale. L'idée sous-jacente est basée sur la méthode des masques géographiques, utilisée pour modéliser des covariances d'erreur d'ébauche hétérogènes, et appliquée aux cas précipitants (Montmerle et Berre, 2010) et aux événements de brouillard (Ménétrier et Montmerle, 2011). Elle pourrait être particulièrement intéressante pour les variables hydrométéores (Michel *et al.*, 2011), très hétérogènes.

Dans notre cas, les sous-domaines doivent être suffisamment petits pour obtenir un filtrage vraiment hétérogène, mais suffisamment grands pour que l'estimation des critères 4.7 ou 4.9 soit suffisamment robuste, et pour limiter le nombre des optimisations indépendantes. Il est important de noter que la positivité des variances filtrées est conservée par cette méthode. Le partitionnement du domaine peut être arbitraire (ex. : tuiles régulières), ou basé sur un critère météorologique (ex. : zones précipitantes/non précipitantes). Le filtrage peut être parallélisé de façon triviale, pour chaque sous-domaine, et la méthode conserve donc un coût de calcul acceptable.

Distribution des longueurs de filtrage

La figure 5.8 montre un exemple de partitionnement en tuiles régulières de résolution croissante. À la résolution maximale, la distribution des longueurs de filtrage est cohérente avec les sources attendues d'hétérogénéité, déjà notées sur la figure 2.16 : des valeurs plus importantes dans les zones maritimes caractérisées par des flux entrant depuis les champs coupleurs (ex. : ouest de la Corse et de la Sardaigne, sud-ouest de l'Angleterre), et des valeurs plus faibles dans les zones de topographie abrupte (ex. : Alpes, Pyrénées, Corse et Sardaigne). La corrélation positive entre les longueurs de portée des corrélations d'erreur d'ébauche et les longueurs de filtrage, détaillée dans la figure 4.2, est donc très clairement illustrée dans la figure 5.8. La longueur de filtrage est aussi plus grande dans des zones où les variances asymptotiques semblent plutôt homogènes (ex. : sud-ouest de la France), ce qui correspond à la corrélation négative entre l'écart-type des variances asymptotiques (s, défini dans la section 4.3) et la longueur de filtrage. De plus, les variances filtrées finales reflètent bien l'hétérogénéité de la longueur de filtrage, tout en étant continues grâce au lissage aux frontières des sous-domaines.

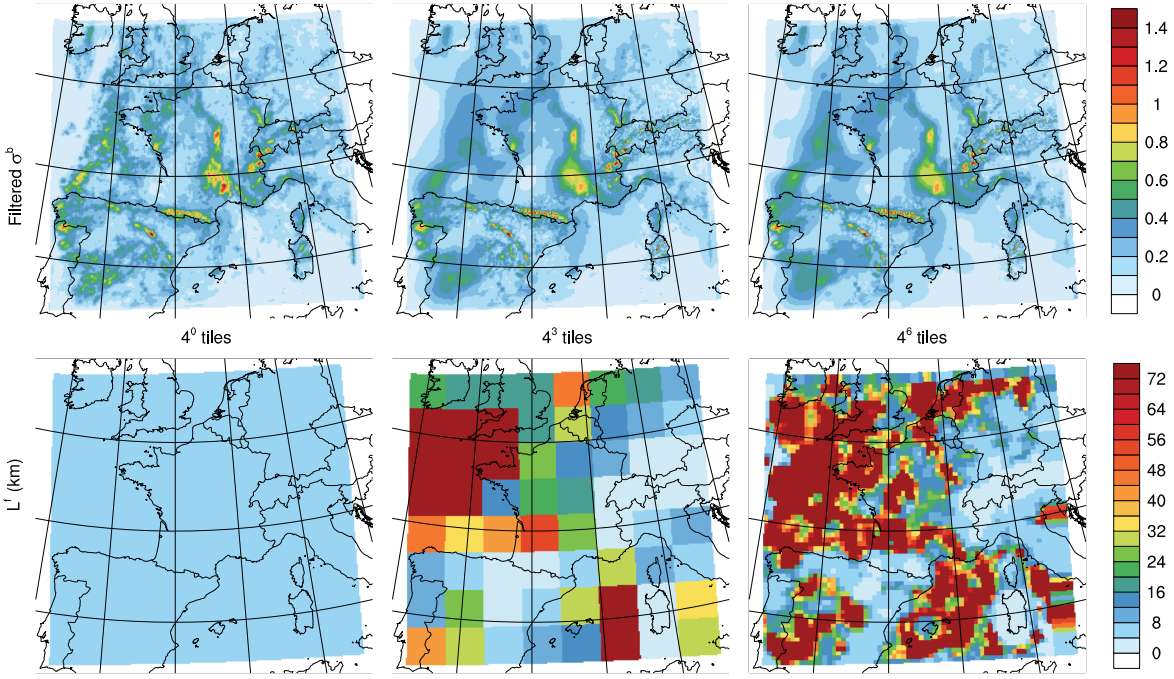


Figure 5.8. – Ecarts-types d'erreur d'ébauche filtrés pour la divergence non balancée (en haut, 10^{-3} s^{-1}) et longueurs de filtrage correspondantes (en bas, km), au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa), avec un nombre de tuiles croissant de gauche à droite (1, 64 et 4096).

Performances du filtrage

Cette méthode de filtrage hétérogène a de meilleures performances (mesurées par la RMSE) que le filtrage homogène, comme le montre la figure 5.9. Cependant, l'amplitude de la réduction de RMSE en fonction du nombre de tuiles varie selon le champ à filtrer. Dans la figure 5.9, on voit que pour un champ très hétérogène comme η_u au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa), la RMSE diminue quand le nombre de tuiles augmente et sature à un plateau pour 4^3 tuiles, quelle que soit la taille de l'ensemble. Pour q_u au même niveau, un comportement plus contrasté est observé. Pour l'ensemble à 12 membres, l'amélioration se poursuit quand le nombre de tuiles croit, avec une saturation après 4^5, tandis que l'ensemble à 6 membres montre une augmentation de la RMSE quand le nombre de tuiles dépasse 4^4. Deux explications à cette dégradation de performance peuvent être envisagées :

- le gain dû à une hétérogénéité accrue est pollué par des artefacts aux frontières des tuiles,
- pour des tuiles de petite taille, l'estimation du critère d'optimalité est moins robuste du fait d'un nombre d'échantillons moindre.

Séparer le domaine total en sous-domaines précipitants/non précipitants donne aussi un impact positif, puisque les performances de ce partitionnement sont à peu près équivalentes à celles d'un découpage en 4^2 tuiles régulières (cf. l'histogramme de droite dans la figure 5.9).

Le tableau 5.1 donne le ratio de dispersion spatiale, la corrélation spatiale et l'impact relatif en RMSE :

$$\Delta \log(\mathrm{RMSE}) = \frac{\mathrm{RMSE}(\widehat{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}}) - \mathrm{RMSE}(\widetilde{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}})}{\mathrm{RMSE}(\widetilde{\mathbf{v}}, \widetilde{\mathbf{v}}^{\mathrm{ref}})} \tag{5.16}$$

Des variances de η_u et q_u au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa) calculées avec un ensemble de 6 membres, et filtrées de façon homogène ou hétérogène sont comparées. Le filtrage hétérogène est effectué

sur 4^6 tuiles régulières pour η_u et 4^2 tuiles pour q_u, ce qui correspond respectivement à leurs partitionnements optimaux d'après la figure 5.9. La faible amélioration du filtrage hétérogène pour q_u est due à un ratio de dispersion spatiale et une corrélation légèrement meilleurs. À l'inverse pour η_u, l'amélioration significative du filtrage hétérogène est principalement due à une meilleure corrélation, même si le ratio de dispersion spatiale converge aussi vers 1.

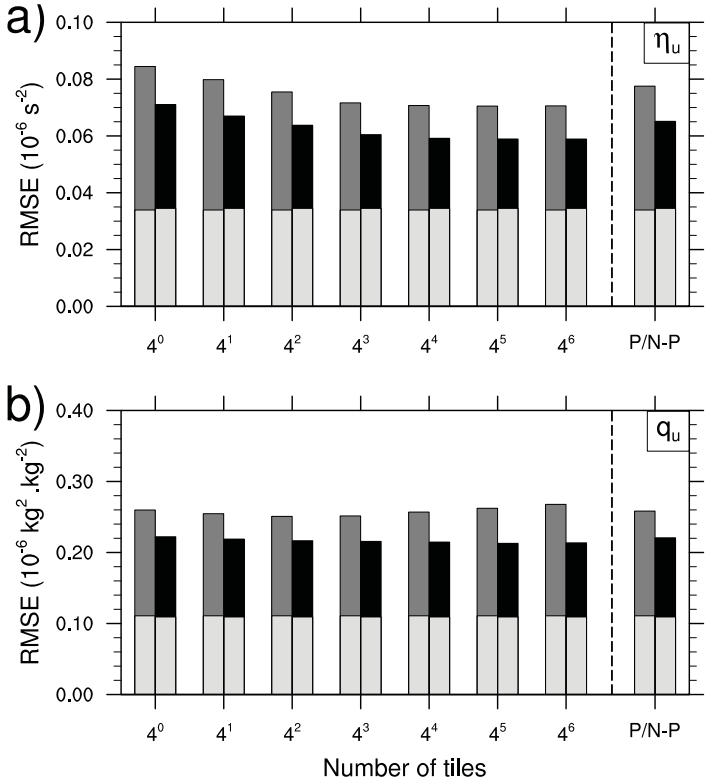


Figure 5.9. – Histogrammes de RMSE sur les variances d'erreur d'ébauche de divergence non balancée (a) et d'humidité spécifique non balancée (b) au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa), calculées avec 6 (gris) et 12 membres (noir). La référence est calculée à partir d'un ensemble indépendant de 78 membres, son incertitude (équation 5.15) étant illustrée par la zone grisé claire. Les variances sont filtrées de façon hétérogène par le critère général 4.7 sur des sous-domaines, en utilisant de gauche à droite : 4^0 (i.e. filtrage homogène sur le domaine complet) à 4^6 tuiles, et finalement un masque précipitant/non précipitant.

Table 5.1. – Comparaison des filtres homogène et hétérogène appliqués aux variances de divergence non balancée (η_u) et d'humidité spécifique non balancée (q_u) au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa), calculées avec 6 membres. Le filtrage hétérogène est effectué sur 4^6 tuiles régulières pour η_u et 4^2 tuiles pour q_u. Les diagnostics sont le ratio de dispersion spatiale (SR), la corrélation spatiale (cor) et l'impact relatif en RMSE (cf. section 5.1.2 pour plus de détail).

Variable	Nombre de tuiles	SR	cor	$\Delta \log$(RMSE)
η_u	1	0.89	0.79	-39%
	4^6	0.92	0.85	-49%
q_u	1	0.85	0.84	-42%
	4^2	0.87	0.85	-44%

Ainsi, on a montré que la théorie du filtrage des variances développée dans la section 4.1 peut être appliquée à un filtrage hétérogène de façon directe, à un coût de calcul certes plus important, mais toujours accessible. Les bénéfices du filtrage hétérogène comparé au filtrage homogène sont clairs, mais dépendent de la variable considérée. Pour tirer le meilleur parti d'un tel filtrage hétérogène, un compromis doit être trouvé entre le coût de calcul et l'amélioration attendue sur la précision des variances filtrées. L'étude de cet amélioration potentielle devra être étudiée pour les autres variables, et pour tous les niveaux du modèle.

5.2. Filtrage des tenseurs LCH

On présente ici le principal complément à l'article Ménétrier *et al.* (2014c), qui concerne le filtrage des tenseurs LCH, déjà définis dans la section 2.2.3 et dans l'annexe A.1.1.

5.2.1. Limitations du filtrage des longueurs de portée

Pannekoucke et Massart (2008) proposent d'exprimer les tenseurs LCH par :

$$\widetilde{\boldsymbol{H}}^{\mathrm{BPB}}_{\alpha\beta} = \frac{1}{\widetilde{\mathbf{L}}^{2}_{\alpha\beta}} \tag{5.17}$$

où $\widetilde{\boldsymbol{H}}^{\mathrm{BPB}}$ est l'estimation du tenseur par la méthode proposée par Belo Pereira et Berre (2006), donnée par l'équation 2.14a, et α et β définissent deux directions. Les valeurs diagonales $\widetilde{\mathbf{L}}_{\alpha\alpha}$ correspondent à des longueurs de portée dans les directions du repère choisi, toujours positives. Les valeurs non diagonales $\widetilde{\mathbf{L}}^{2}_{\alpha\beta}$ avec $\alpha \neq \beta$ peuvent être positives ou négatives.

Dans Raynaud et Pannekoucke (2012), une théorie est développée pour quantifier l'erreur d'échantillonnage des $\widetilde{\mathbf{L}}_{\alpha\alpha}$, afin de les filtrer spatialement dans un cas unidimensionnel idéalisé. Cette voie n'a pas été poursuivie ici pour plusieurs raisons :

1. Une des hypothèses du développement de Raynaud et Pannekoucke (2012) consiste à supposer que les variances sont homogènes localement, afin de pouvoir négliger les dérivées spatiales de l'écart-type dans l'expression générale de $\widetilde{\boldsymbol{H}}^{\mathrm{BPB}}$ donnée par l'équation 2.14a :

$$(\boldsymbol{D}_{\alpha}\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^{b})_{i}(\boldsymbol{D}_{\beta}\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^{b})_{i} \ll \mathrm{Cov}_{N}\left((\boldsymbol{D}_{\alpha}\widetilde{\mathbf{x}}^{b})_{i}, (\boldsymbol{D}_{\beta}\widetilde{\mathbf{x}}^{b})_{i}\right) \tag{5.18}$$

   Or, des tests expérimentaux ont montré que cette hypothèse était mise en défaut dans un grand nombre de cas à l'échelle convective. La figure 5.10 montre la proportion de rejets de l'hypothèse 5.18 pour des sous-ensembles indépendants de 6 et 84 membres, ce rejet étant qualifié par le seuil :

$$\frac{(\boldsymbol{D}_{\alpha}\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^{b})_{i}(\boldsymbol{D}_{\beta}\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^{b})_{i}}{\mathrm{Cov}_{N}\left((\boldsymbol{D}_{\alpha}\widetilde{\mathbf{x}}^{b})_{i}, (\boldsymbol{D}_{\beta}\widetilde{\mathbf{x}}^{b})_{i}\right)} > 0,1 \tag{5.19}$$

   Plus de la moitié des cas sont ainsi rejetés pour les composantes zonale et méridienne du tenseur, et ce pour toutes les variables. Pour les composantes croisées, ce taux de rejet est toujours supérieur à 35%. Le nombre de cas valides augmente avec le nombre de membres considérés, mais reste toujours important, notamment pour les variables dynamiques qui sont de petite échelle.

2. Une autre hypothèse consiste à supposer que la taille de l'ensemble est suffisamment grande pour pouvoir effectuer un développement de Taylor. Cette hypothèse, qui néces-

site un ensemble d'une vingtaine de membres au minimum, limite la validité du filtrage pour de petits ensembles.

3. Enfin, en prolongeant le filtrage des $\widetilde{\mathbf{L}}_{\alpha\beta}$ au cas bidimensionnel, rien n'assure dans cette méthodologie que le tenseur $\widehat{\boldsymbol{H}}$ reconstitué à partir des $\widehat{\mathbf{L}}_{\alpha\alpha}$ filtrés soit défini positif.

Pour toutes ces raisons, il nous semble préférable de filtrer les composantes du tenseur LCH estimées à partir de l'ensemble par la méthode proposée par Michel (2012b) et étendue dans Ménétrier *et al.* (2014a), dont l'expression est donnée par l'équation 2.14b. Cette méthode présente en effet l'avantage de garantir le caractère défini positif des tenseurs estimés. Comme on le verra dans la section suivante, il est également possible de s'assurer que les tenseurs dont les composantes ont été filtrées respectent cette condition.

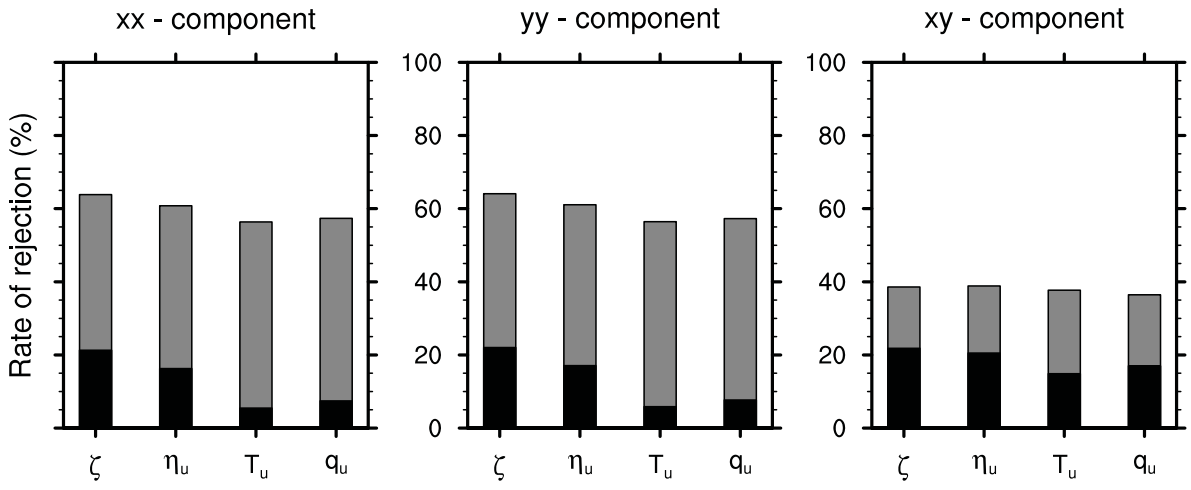


Figure 5.10. – Proportion de cas où l'hypothèse 5.18 n'est pas valable (critère 5.19), dans les direction zonale (xx), méridienne (yy) et croisée (xy), pour l'ensemble AEARO à 6 membres (gris) et à 84 membres (noir), en considérant les champs suivants : vorticité (ζ), divergence non balancée (η_u), température non balancée (T_u) et humidité spécifique non balancée (q_u).

5.2.2. Filtrage des composantes diagonales

En utilisant l'estimation donnée par l'équation 2.14b, les composantes des tenseurs LCH sont exprimées comme des variances et des covariances. Par analogie avec le filtrage des variances, on peut donc envisager l'utilisation des méthodes de filtrage développées dans la section 4.1 afin de filtrer les composantes diagonales du tenseur. Cependant, dans la formule 2.14b, les membres $\{\widetilde{\mathbf{x}}^b_p\}_{1\leq p\leq N}$ de l'ensemble sont normalisés par l'écart-type échantillonné $\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b$, ce qui signifie que chaque membre normalisé contient déjà de l'information venant des autres membres de l'ensemble. Les membres normalisés ne sont donc plus indépendants, et en conséquence, les résultats théoriques sur l'erreur d'échantillonnage des moments centrés (cf. section 3.1) ne sont plus valables. La théorie des critères de filtrage optimal des covariances n'est dans ce cas plus exacte. On s'attend à ce que la divergence avec la théorie soit d'autant plus forte que les ensembles sont de petite taille, mais qu'elle s'atténue quand la taille de l'ensemble augmente, puisque l'écart-type échantillonné $\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b$ tend vers une valeur asymptotique indépendante des membres de l'ensemble.

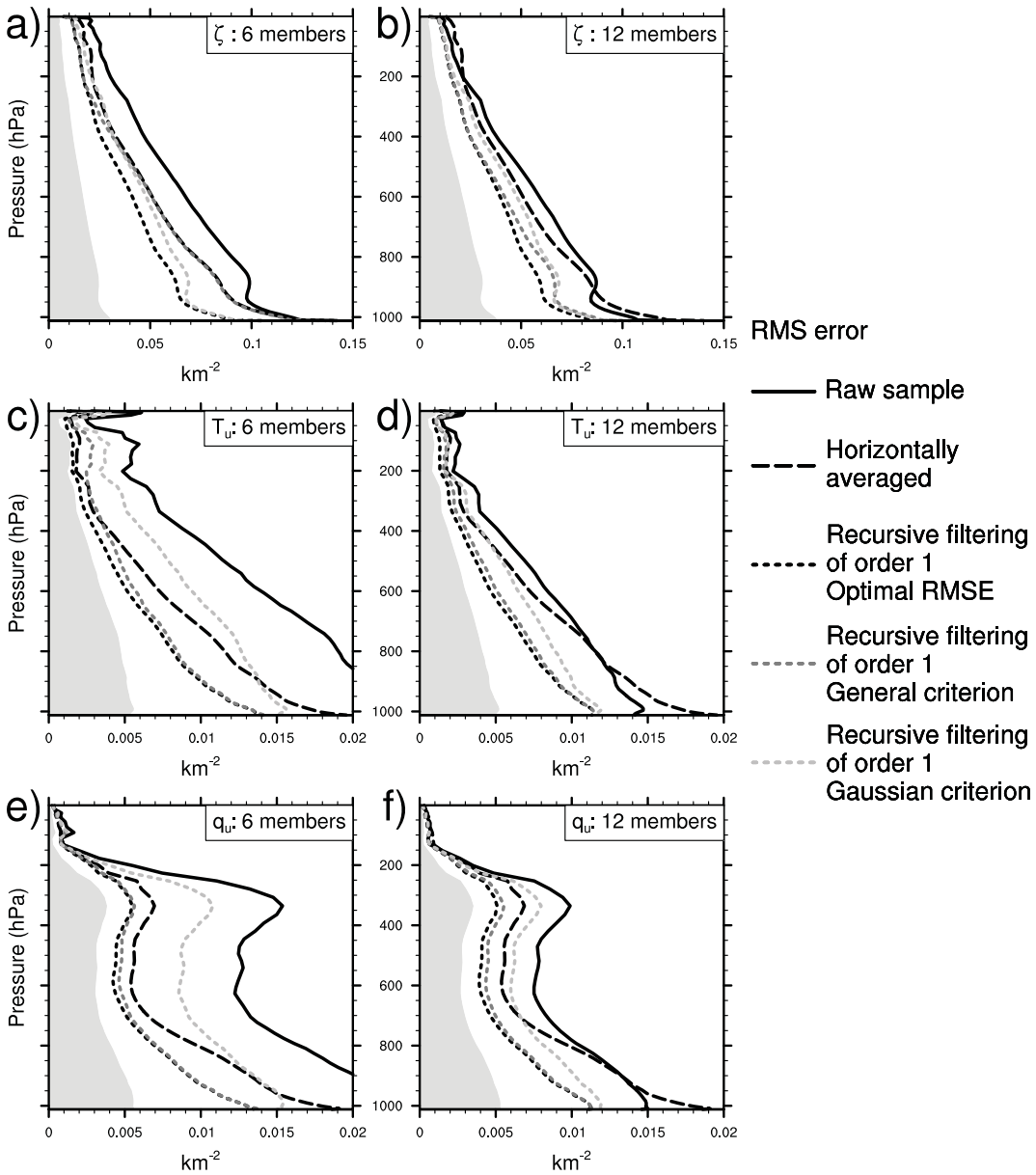


Figure 5.11. – RMSE des composantes diagonales des tenseurs LCH estimés par l'équation 2.14b pour la vorticité (a et b), la température non balancée (c et d), et l'humidité spécifique non balancée (e et f), pour des ensembles de 6 (a, c et e) ou 12 membres (b, d et f). La référence est calculée à partir d'un ensemble indépendant de 78 membres, son incertitude (équation 5.15) étant illustrée par la zone grisée. Les configurations testées sont : variances brutes (trait plein noir), moyennées horizontalement (tiretés noirs), et filtrées par un filtre récursif d'ordre 1 dont la longueur de filtrage est calculée pour minimiser la RMSE en connaissant la référence (pointillés sombres), pour vérifier le critère général 4.7 (pointillés moyens), ou pour vérifier le critère gaussien 4.9 (pointillés clairs).

Si l'on passe outre cette restriction théorique, il est possible de filtrer les composantes diagonales des tenseurs par un filtrage homogène et isotrope, grâce aux critères 4.7 et 4.9. La figure 5.11 montre que pour T_u et q_u, le critère général 4.7 permet de trouver une longueur de filtrage qui se rapproche de l'optimalité, surtout en basses couches, et qui est nettement meilleure en tout cas que celle donnée par le critère gaussien 4.9. Pour ζ, qui est une variable de plus petite

échelle, le critère général 4.7 fonctionne très mal pour l'ensemble de 6 membres, mais déjà beaucoup mieux pour l'ensemble de 12 membres, même si les résultats obtenus ne sont pas optimaux. Dans tous les cas, ce critère donne des résultats intéressants, meilleurs qu'avec une simple moyenne horizontale des tenseurs.

5.2.3. Filtrage des composantes non diagonales

Il est nécessaire de veiller au caractère défini positif du tenseur filtré, requis pour toute application ultérieure. Plusieurs stratégies peuvent être mises en œuvre pour filtrer toutes les composantes du tenseur tout en remplissant cette condition.

Évaluation du tenseur complet

Par analogie avec la RMSE utilisée pour évaluer les variances, la qualité des tenseurs LCH filtrés $\widehat{\boldsymbol{H}}$ est évaluée par la norme de Frobenius (frob) vis-à-vis d'une référence indépendante $\widetilde{\boldsymbol{H}}^{\mathrm{ref}}$:

$$\mathrm{frob}(\widehat{\boldsymbol{H}}, \widetilde{\boldsymbol{H}}^{\mathrm{ref}}) = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \sum_{1\leq\alpha,\beta\leq d} \left(\widehat{H}_{\alpha\beta|i} - \widetilde{H}^{\mathrm{ref}}_{\alpha\beta|i}\right)^2} \tag{5.20}$$

où, dans l'espace physique à d dimensions, on note $H_{\alpha\beta|i}$ la composante d'indices (α, β) du tenseur LCH $\boldsymbol{H}$ au point d'indice i.

Première stratégie : filtrage commun

On souhaite filtrer chaque composante (α, β) du tenseur indépendamment, par un filtrage linéaire :

$$\widehat{H}_{\alpha\beta|i} = \sum_{j=1}^{n} F_{\alpha\beta|ij} \widetilde{H}_{\alpha\beta|j} + f_{\alpha\beta|i} \tag{5.21}$$

où $\boldsymbol{F}$ est le gain du filtre de dimension $d \times d \times n \times n$, et $\boldsymbol{f}$ l'offset de dimension $d \times d \times n$. Pour maintenir la symétrie des tenseurs LCH, les opérateurs $\boldsymbol{F}$ et $\boldsymbol{f}$ sont eux-mêmes symétriques par rapport aux deux premières dimensions :

$$F_{\beta\alpha|ij} = F_{\alpha\beta|ij} \quad \text{et} \quad f_{\beta\alpha|i} = f_{\alpha\beta|i} \tag{5.22}$$

On rappelle qu'une matrice réelle $\mathbf{A}$ de taille $d \times d$ est définie positive si et seulement si pour tout vecteur aléatoire réel $\mathbf{u}$ de taille d :

$$\mathbf{u}^{\mathrm{T}} \mathbf{A} \mathbf{u} = \sum_{1\leq\alpha,\beta\leq d} u_\alpha A_{\alpha\beta} u_\beta > 0 \tag{5.23}$$

Les tenseurs LCH filtrés sont donc définis positifs si et seulement si pour tout vecteur aléatoire $\mathbf{u}$:

$$\sum_{1\leq\alpha,\beta\leq d} u_\alpha \widehat{H}_{\alpha\beta|i} u_\beta = \sum_{1\leq\alpha,\beta\leq d} u_\alpha \Big(\sum_{j=1}^{n} F_{\alpha\beta|ij} \widetilde{H}_{\alpha\beta|j} + f_{\alpha\beta|i}\Big) u_\beta > 0 \tag{5.24}$$

Les trois conditions suivantes :

— le gain du filtre $F_{\alpha\beta|ij}$ est similaire pour toutes les composantes (α, β), d'où :

$$\sum_{1\leq\alpha,\beta\leq d} u_\alpha \sum_{j=1}^{n} F_{\alpha\beta|ij} \widetilde{H}_{\alpha\beta|j} u_\beta = \sum_{j=1}^{n} F_{ij} \sum_{1\leq\alpha,\beta\leq d} u_\alpha \widetilde{H}_{\alpha\beta|j} u_\beta \tag{5.25}$$

— toutes les composantes du gain du filtre $\boldsymbol{F}$ sont positives, d'où :

$$\sum_{j=1}^{n} F_{ij} \sum_{1\leq\alpha,\beta\leq d} u_{\alpha} \widetilde{H}_{\alpha\beta|j} u_{\beta} > 0 \tag{5.26}$$

— les offsets $\boldsymbol{f}$ sont semi-définis positifs, d'où :

$$\sum_{1\leq\alpha,\beta\leq d} u_{\alpha} f_{\alpha\beta|i} u_{\beta} \geq 0 \tag{5.27}$$

sont suffisantes pour assurer que les tenseurs filtrés demeurent définis positifs.

Une première approche, relativement conservatrice, est de filtrer toutes les composantes du tenseur avec la plus grande longueur de filtrage obtenue à l'issue des filtrages individuels des composantes diagonales. La figure 5.12 montre que cette technique donne des résultats dont l'allure est très similaire à celle de la RMSE sur les termes diagonaux (figure 5.11). Cette proximité des résultats suggère que l'utilisation d'une longueur de filtrage commune pour toutes les composantes ne nuit pas à la qualité des composantes diagonales filtrées, et que le filtrage des composantes non diagonales est suffisamment efficace pour réduire le bruit d'échantillonnage.

Seconde stratégie : séparation de type variances/corrélations

Une seconde stratégie pour conserver le caractère défini positif du tenseur filtré consiste à séparer le tenseur en l'équivalent des variances (composantes diagonales) et celui des corrélations (composantes non diagonales normalisées) :

$$\widetilde{H}_{\alpha\beta|i} = \sqrt{\widetilde{H}_{\alpha\alpha|i} \widetilde{H}_{\beta\beta|i}}\, \widetilde{C}_{\alpha\beta|i} \tag{5.28}$$

Le filtrage de $\widetilde{\boldsymbol{H}}_{\alpha\alpha}$ et $\widetilde{\boldsymbol{H}}_{\beta\beta}$ utilise les critères 4.7 et 4.9 à l'instar des variances d'erreur d'ébauche. Pour le filtrage de la "corrélation" $\widetilde{\boldsymbol{C}}_{\alpha\beta}$, il n'existe aucune théorie, et l'on peut donc recourir à une méthode heuristique. Dans le cadre d'un filtrage homogène et isotrope, on se propose par exemple de filtrer ce champ par le même noyau que les composantes diagonales $\widetilde{\boldsymbol{H}}_{\alpha\alpha}$ et $\widetilde{\boldsymbol{H}}_{\beta\beta}$, avec une longueur de filtrage égale à la moyenne géométrique des longueurs de filtrage optimisées pour ces composantes. L'avantage de cette méthode est de pouvoir conserver un filtrage distinct pour chaque composante diagonale. Les résultats du filtrage obtenus (non montrés) sont de qualité équivalente à ceux de la première méthode donnés par la figure 5.12.

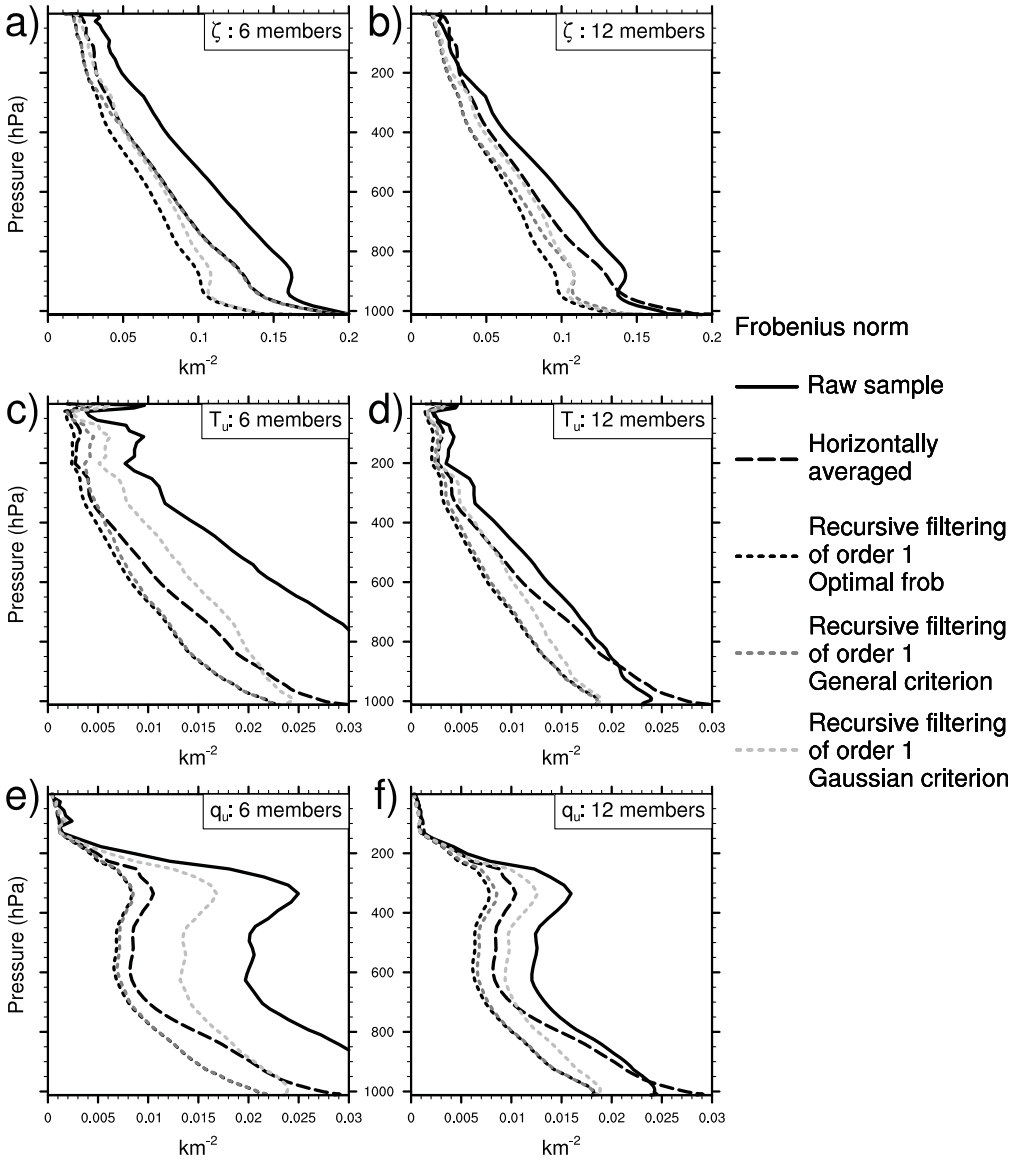


Figure 5.12. – Norme de Frobenius des tenseurs LCH estimés par l'équation 2.14b pour la vorticité (a et b), la température non balancée (c et d), et l'humidité spécifique non balancée (e et f), pour des ensembles de 6 (a, c et e) ou 12 membres (b, d et f), par rapport à une référence calculées à partir d'un ensemble indépendant de 78 membres. Les configurations testées sont : tenseurs bruts (trait plein noir), moyennés horizontalement (tiretés noirs), et filtrés à l'identique pour toutes les composantes (voir texte) par un filtre récursif d'ordre 1 dont la longueur de filtrage est calculée pour minimiser la norme de Frobenius en connaissant la référence (pointillés sombres), ou comme la plus grande longueur obtenue à l'issue des filtrages individuels des composantes diagonales, en vérifiant le critère général 4.7 (pointillés moyens) ou le critère gaussien 4.9 (pointillés clairs).

5.2.4. Impact du filtrage des tenseurs LCH

Effet sur le biais des longueurs de portée

La longueur de portées totale a tendance à être positivement biaisée quand le tenseur est échantillonné par un ensemble de petite taille, comme l'illustre la figure 2.17. La source de ce

biais très important, mentionné dans Pannekoucke *et al.* (2008), réside dans la convexité de l'opération liant le tenseur à la longueur de portée totale. L'inégalité de Jensen (1906) stipule dans sa forme probabiliste que pour toute fonction convexe f de la variable aléatoire X :

$$f\Big(\mathbb{E}[X]\Big) \leq \mathbb{E}\Big[f(X)\Big] \tag{5.29}$$

Or, si on se restreint à un cas unidimensionnel, l'équation 2.11 définissant la longueur de portée devient :

$$\mathcal{L}^b = \sqrt{\frac{1}{\boldsymbol{H}}} \tag{5.30}$$

et la fonction $f : x \to x^{-1/2}$ est convexe. On en conclut qu'il existe un biais pour la longueur de portée estimée $\widetilde{\mathcal{L}}^b$ par rapport à la valeur $\mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{H}}]^{-1/2}$:

$$\mathbb{E}[\widetilde{\mathcal{L}}^b] = \mathbb{E}\left[\sqrt{\frac{1}{\widetilde{\boldsymbol{H}}}}\right] \geq \sqrt{\frac{1}{\mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{H}}]}} \tag{5.31}$$

Ce biais positif est d'autant plus important que le tenseur $\widetilde{\boldsymbol{H}}$ s'écarte de son espérance, ce qui est le cas pour les ensembles de petite taille. Comme l'inégalité de Jensen reste valable pour une moyenne spatiale, le résultat s'applique aussi lorsque l'espérance $\mathbb{E}$ est remplacée par une moyenne spatiale μ^{S}.

La figure 5.13 montre ainsi l'effet de la taille de l'ensemble sur la moyenne spatiale de la longueur de portée, qui est similaire pour toutes les variables et tous les niveaux. Le filtrage des tenseurs a pour conséquence de réduire la variabilité spatiale de $\widetilde{\boldsymbol{H}}$, ce qui réduit d'autant la moyenne spatiale de $\widetilde{\mathcal{L}}^b$. Ainsi, on constate sur la figure 5.13 que les tenseurs issus des ensembles de petite taille, comportant davantage de bruit d'échantillonnage, sont filtrés plus intensément et possèdent au final une variabilité spatiale plus faible, et donc une longueur de portée moyenne plus faible. Plus la taille de l'ensemble augmente, plus la différence entre les longueurs de portée moyenne avec et sans filtrage diminue. La figure 5.14 illustre cet aspect pour q_u.

Diminution du bruit d'échantillonnage

La figure 5.14 illustre l'impact du filtrage spatial des composantes du tenseur sur le bruit d'échantillonnage. Comme on l'a montré dans la figure 2.16, ce bruit d'échantillonnage affecte particulièrement les ensembles de petite taille. Il est à l'origine de directions incorrectes pour les ellipses, d'amplitudes exagérées pour les longueurs de portées, et génère une prolifération de maxima locaux de ces longueurs. Le filtrage spatial des composantes du tenseur semble très efficace pour limiter l'impact de ce bruit d'échantillonnage, tout en conservant en grande partie le signal d'intérêt. On retrouve un aspect fondamental des critères de filtrage 4.7 et 4.9 : l'intensité du filtrage diminue quand la taille de l'ensemble augmente, ce qui permet de préserver des structures de plus fine échelle, qui deviennent pertinentes et peuvent être dissociées du bruit.

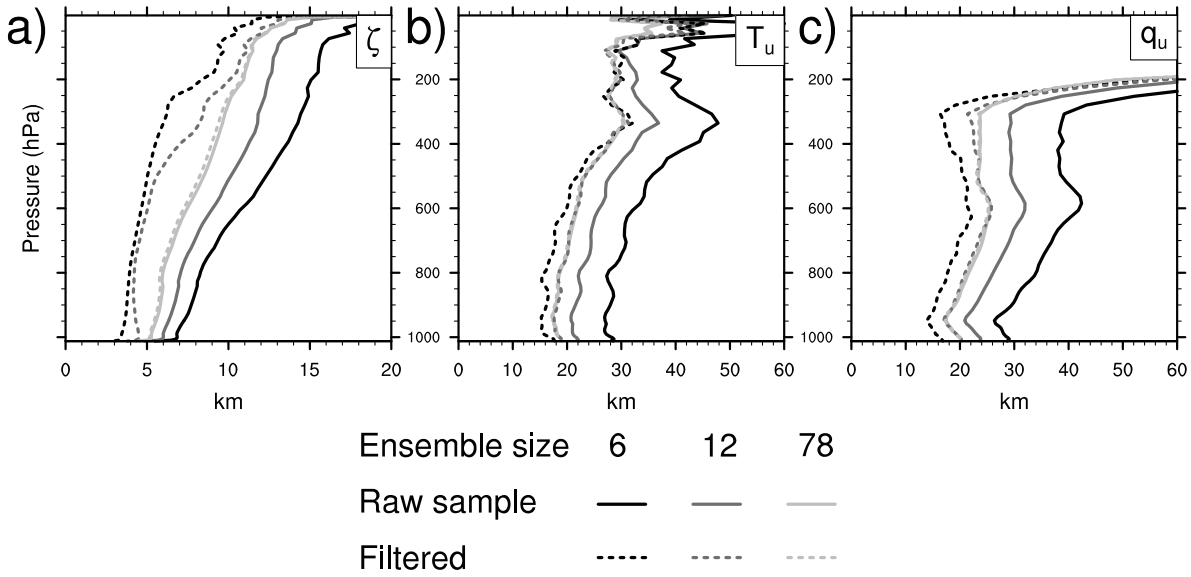


Figure 5.13. – Moyenne spatiale de la longueur de portée totale pour la vorticité (a), la température non balancée (b) et l'humidité spécifique non balancée (c), pour des ensembles de 6 (noir), 12 (gris moyen) ou 78 membres (gris clair). Le tenseurs utilisé pour le calcul de la portée sont bruts (trait plein) ou filtrés par la première méthode (tiretés).

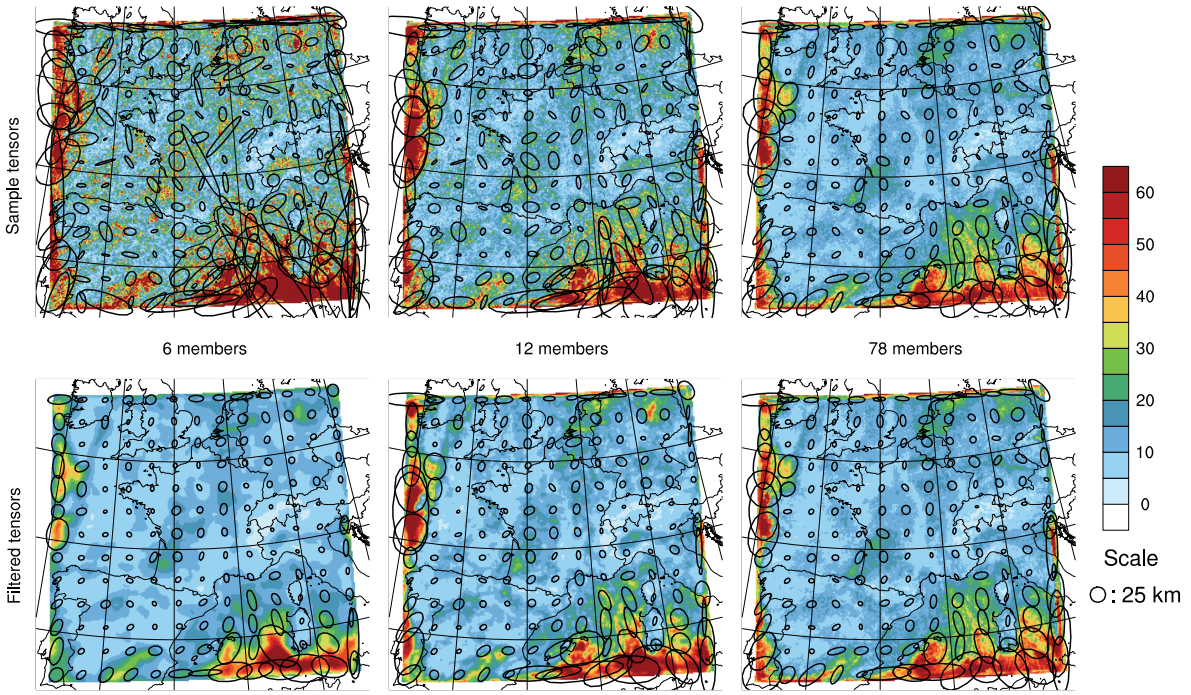


Figure 5.14. – Tenseur LCH d'erreur d'ébauche pour l'humidité spécifique non balancée au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa), brut (en haut) et filtré (critère général 4.7 adapté par la première méthode, en bas), pour des ensembles de taille croissante de gauche à droite (6, 12 et 78). Les ellipses noires représentent les tenseurs LCH normalisés par un facteur constant, et la longueur de portée est donnée par l'échelle de couleur (unité : km).

5.3. Localisation des covariances

Comparée au filtrage des variances, la localisation des covariances nécessite des ensembles plus grands afin d'obtenir des estimations fiables des covariances. En effet, le nombre d'éléments à estimer passe de n pour les variances à n^2 pour les covariances. Dans cette section, plusieurs méthodes décrites dans la partie 4.2 sont comparées. Elles permettent de diagnostiquer des fonctions de localisation quasi optimales à partir de l'ensemble lui-même. Pour illustrer l'impact de la taille de l'ensemble, ces méthodes sont appliquées à deux ensembles de 30 et 90 membres.

5.3.1. Diagnostic des fonctions de localisation horizontale

La matrice des covariances échantillonnées $\widetilde{\mathbf{B}}$ est localisée par un produit de Schur avec une matrice $\mathbf{L}$, pour obtenir une matrice filtrée $\widehat{\mathbf{B}}$:

$$\widehat{\mathbf{B}} = \mathbf{L} \circ \widetilde{\mathbf{B}} \tag{5.32}$$

Dans la section 4.2, on a montré que, sous une hypothèse d'ergodicité spatiale, plusieurs approximations de la localisation optimale étaient disponibles, données par les équations 4.21.

Ces méthodes ne fournissent qu'un diagnostic brut de la fonction de localisation. Cette fonction diagnostiquée n'est pas nécessairement semi-définie positive, ce qui serait préférable pour une utilisation pratique. En effet, le théorème de Schur (1911) stipule que si la matrice de localisation est semi-définie positive, alors la matrice filtrée est également semi-définie positive. Ainsi, il est nécessaire d'ajuster les fonctions de localisation diagnostiquées à l'aide de fonctions semi-définies positives avant leur utilisation. Pour effectuer cet ajustement, on choisit d'utiliser la famille des fonctions hypergaussiennes décrites dans Purser *et al.* (2003b). Seuls deux paramètres sont requis pour définir une fonction hypergaussienne : un paramètre d'échelle ℓ et un paramètre de forme γ. Dans notre cas, ils sont déterminés pour minimiser l'erreur quadratique moyenne entre les fonctions de localisation diagnostiquées et ajustées.

La figure 5.15 montre que les fonctions de localisation diagnostiquées deviennent plutôt bruitées avec la distance, approximativement quand leur valeur devient plus petite que 0.5, mais que les fonctions ajustées sont presque similaires pour les trois méthodes testées. Comme prévu, le bruit est plus important pour les méthodes 4.21a et 4.21b, où les covariances, moments d'ordre quatre et produits de variances sont sujets à des moyennes spatiales et angulaires. À l'inverse, la méthode 4.21c est basée sur des moyennes de corrélations échantillonnées, qui sont naturellement bornées par -1 et 1, ce qui donne une estimation plus stable. Comme il est suggéré dans les illustrations analytiques de la section 4.3, les fonctions de localisation ont un sommet plutôt plat par rapport aux fonctions de corrélation, et elles s'élargissent avec la taille de l'ensemble, confirmant ainsi des études antérieures comme celle de Lorenc (2003).

La localisation optimale étant évidemment liée aux covariances d'erreur d'ébauche qui sont fortement dépendantes de l'écoulement, on s'attend à des variations spatio-temporelles significatives de sa valeur dans le contexte d'un modèle à aire limitée.

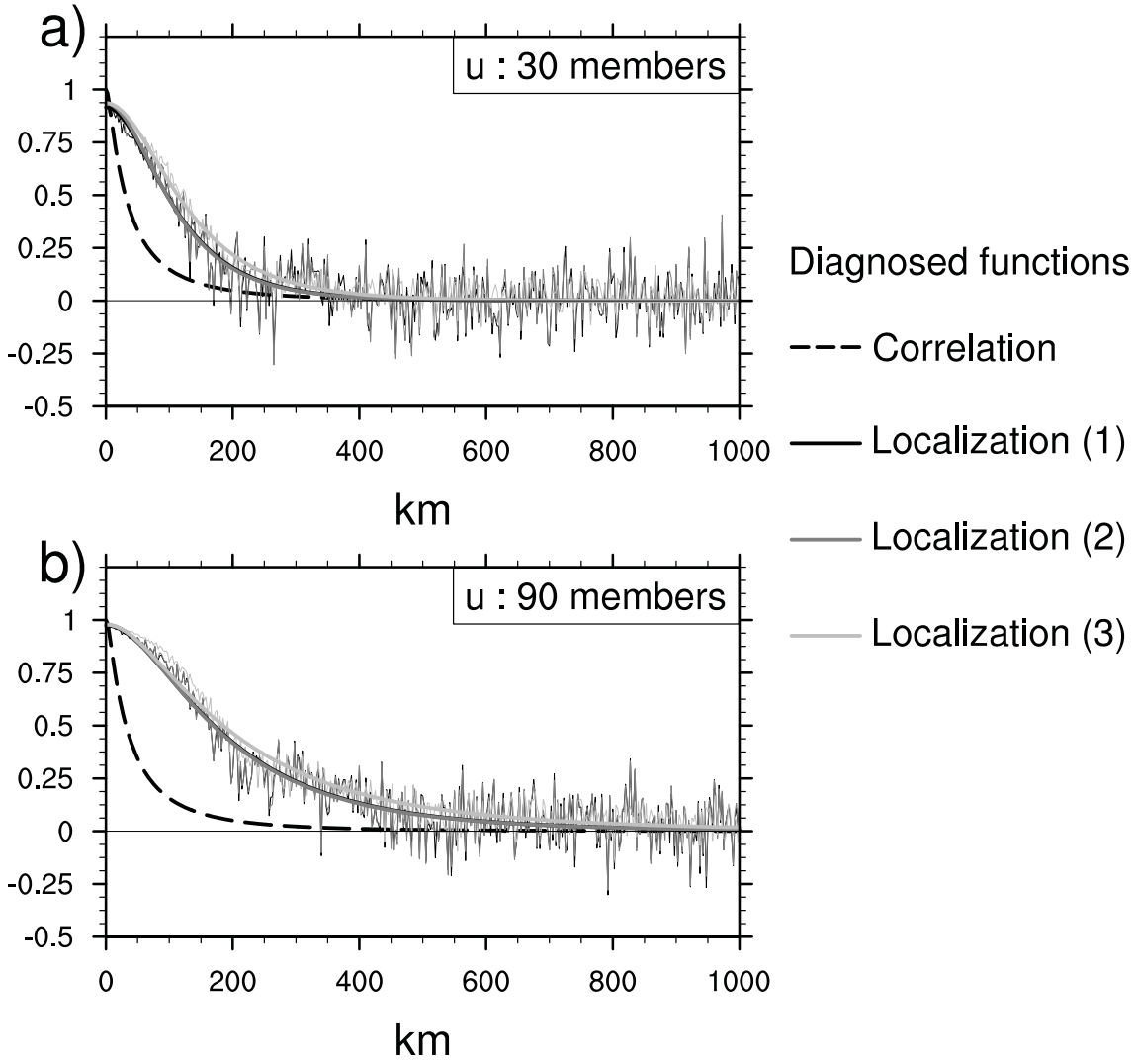


Figure 5.15. – Fonction de corrélation horizontale diagnostiquée (tiretés) et fonctions de localisation horizontale diagnostiquées (trait plein fin) et ajustée (trait plein épais), pour le vent zonal au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa), calculées par les équations 4.21a (1), 4.21b (2) et 4.21c (3), pour des ensembles de 30 (a) et 90 membres (b). Les résultats sont donnés pour des prévisions issues du 3 novembre 2011 à 18 h UTC seulement.

5.3.2. Diagnostic des longueurs de localisation horizontale

La longueur de localisation $\mathcal{L}^{\mathrm{L}}$ introduite dans la section 4.2 est un outil d'analyse utile pour étudier les variations des fonctions de localisation selon la variable et le niveau vertical. Pour en obtenir une estimation précise pour les fonctions diagnostiquées par les équations 4.21 et ajustées par des fonctions hypergaussiennes, on utilise la relation démontrée dans l'annexe A.5 en suivant Daley (1991) :

$$\mathcal{L}^{\mathrm{L}} = \frac{\ell}{\exp\left(2\gamma\right)} \tag{5.33}$$

Dans la section 4.2, on montre également qu'à partir des hypothèses de l'équation 4.21c, il existe une relation entre $\mathcal{L}^{\mathrm{L}}$ et la longueur de portée $\widetilde{\mathcal{L}}^{b}$ de l'espérance du tenseur de la hessienne de la fonction de corrélation locale échantillonnée, donnée par l'équation 4.34.

Les profils de longueur de localisation du vent zonal, de la température et de l'humidité spécifique, donnés dans la figure 5.16, montrent qu'il existe une bonne concordance entre les différentes estimations utilisant cette approche. Les variations de longueur de localisation semblent cohérentes : on observe une augmentation régulière pour le vent et la température dans la troposphère, avec une forte diminution au-dessus de la tropopause pour la température. Une telle diminution est probablement due à une augmentation de l'erreur d'échantillonnage pour la température à ces niveaux, comme le montre la figure 5.1. Des valeurs plus élevées sont aussi visibles sous 400 hPa pour la température comparée au vent zonal, reflétant une plus grande uniformité du champ de température à ces niveaux. Pour l'humidité spécifique, les valeurs sont plus uniformes dans toute la troposphère, avec un fort gradient à la tropopause, au-dessus de laquelle les structures d'erreurs deviennent beaucoup plus étendues. Ceci provient du fait de la quasi inexistence d'humidité à ces niveaux, ce qui rend inutile toute localisation.

La longueur de localisation paramétrée à partir du tenseur LCH moyenné de l'équation 4.34 est bien trop courte. Cette différence peut être expliquée par trois raisons principalement :

- La démonstration de l'équation 4.34 dans la section 4.2 est basée sur la commutation de l'espérance statistique et des dérivations spatiales de la fonction de corrélation au carré. En pratique, l'espérance est remplacée par la moyenne spatiale, de sorte que la commutation n'est plus possible, à part dans un cas homogène (comme dans la section 4.3).
- L'équation 4.34 est en fait obtenue dans une représentation continue, et ensuite transformée dans une représentation discrète. Cette transformation peut avoir un impact sur les longueurs estimées, particulièrement pour des fonctions de corrélation pointues, comme c'est le cas ici.
- Il existe en théorie une différence, certes subtile, entre le tenseur correspondant à la fonction de corrélation échantillonnée (équation 4.25) et l'estimation du tenseur correspondant à la fonction de corrélation vraie à partir d'un échantillon (équations 2.14a et 2.14b). Cependant, on a considéré ici que ces deux quantités étaient équivalentes.

Ainsi, la paramétrisation de l'équation 4.34 peut ne pas être très fiable dans le cas de fonctions de corrélation pointues et hétérogènes.

5.3.3. Application de la localisation horizontale

A titre d'illustration, l'impact de la localisation sur les corrélations échantillonnées, calculées avec des ensembles de tailles variées, est montré pour plusieurs points dans la figure 5.17.
Le bruit d'échantillonnage, omniprésent, est clairement visible dans les corrélations échantillonnées, particulièrement pour l'ensemble à 30 membres. L'application d'une fonction de localisation ajustée, utilisant $\bar{\mathbf{L}}^{\mathrm{GC}}$, amortit la majorité du bruit d'échantillonnage, particulièrement dans le cas à 90 membres. L'hétérogénéité et l'anisotropie des fonctions de corrélation sont maintenues en général malgré la localisation, même si des corrélations pertinentes à grande échelle peuvent être amorties, comme dans le coin sud-est du domaine. Comme illustrées dans la figure 5.15, les corrélations à longue distance sont aussi moins amorties pour l'ensemble à 90 membres, puisqu'elles sont plus fiables.

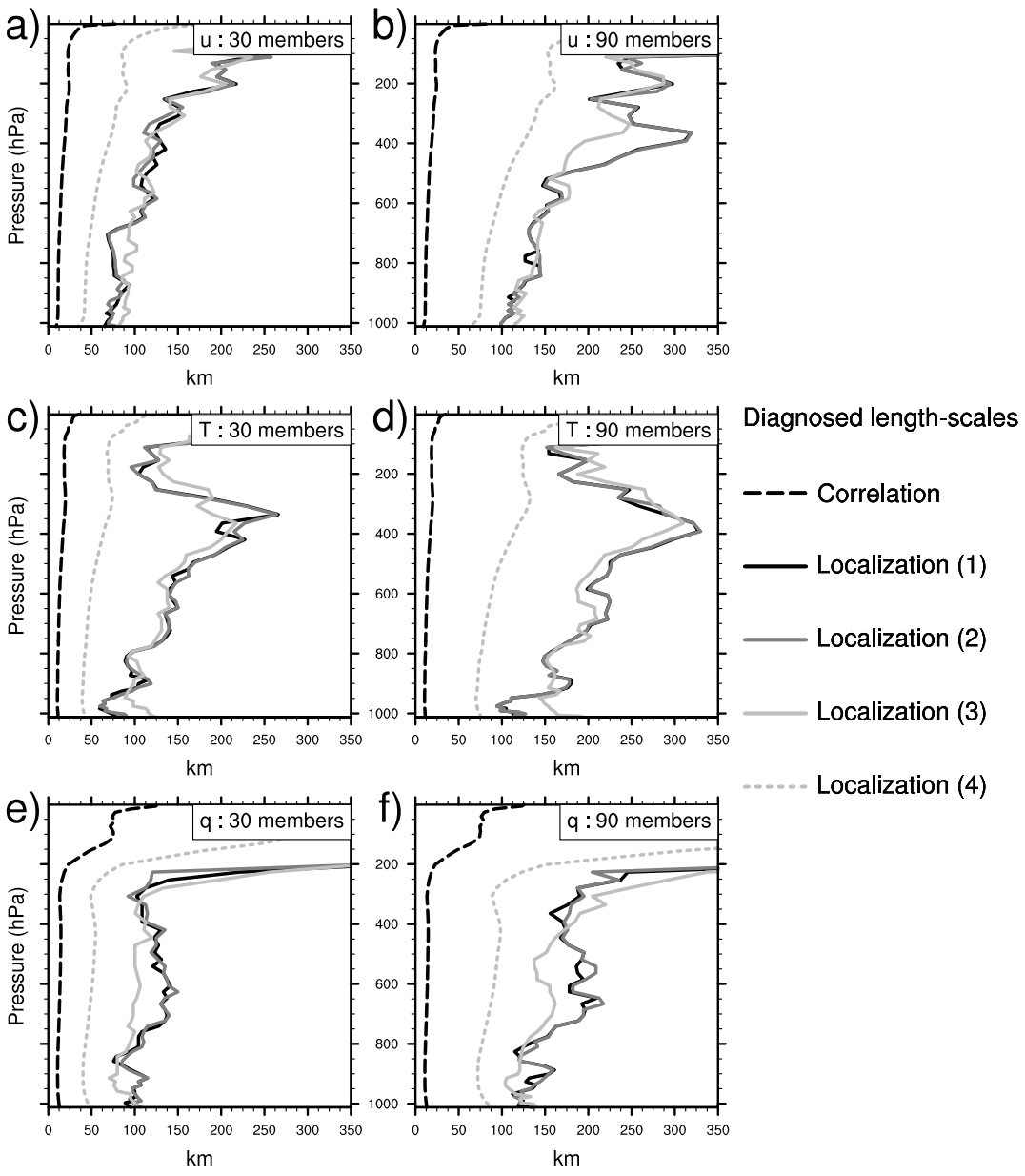


Figure 5.16. – Profils de longueur de portée de la corrélation ajustée (tiretés noirs), de longueurs de localisation ajustée (trait plein) calculées par les équations 4.21a (1), 4.21b (2) et 4.21c (3), et paramétrisée à partir du tenseur LCH moyenné (tiretés gris) par l'équation 4.34, pour des ensembles de 30 (a, c et e) et 90 membres (b, d et f). Les variables testées sont le vent zonal (a et b), la température (c et d) et l'humidité spécifique (e et f). Les résultats sont donnés pour des prévisions issues du 3 novembre 2011 à 18 h UTC seulement.

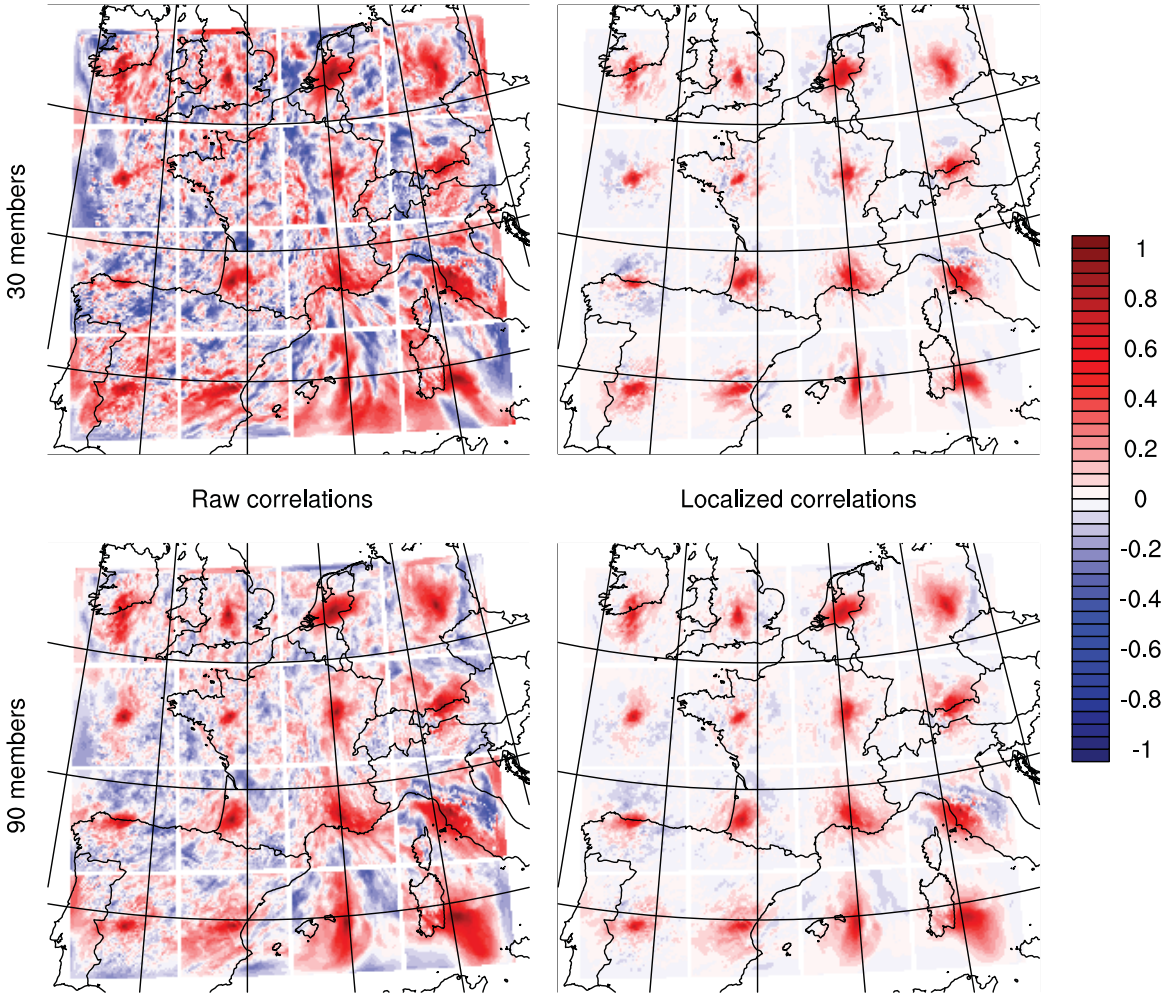


Figure 5.17. – Corrélations brutes (à gauche) et localisées (avec l'équation 4.21c, à droite), pour l'humidité spécifique au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa), avec des ensembles de 30 (en haut) et 90 membres (en bas). Les résultats sont donnés pour des prévisions issues du 3 novembre 2011 à 18 h UTC seulement.

5.3.4. Diagnostic des fonctions de localisation verticale

Comme preuve de concept, on montre dans la figure 5.18 que le formalisme développé dans la section 4.2 pour obtenir des fonctions de localisation horizontale peut aussi être appliqué pour le diagnostic de fonctions de localisation verticale. En remplaçant les corrélations horizontales échantillonnées $\widetilde{\mathbf{C}}$ de l'équation 4.21c par des corrélations verticales échantillonnées, et la moyenne spatiale et angulaire μ^{SA} par une moyenne horizontale seule, il est possible de diagnostiquer des fonctions de localisation verticale homogènes horizontalement, qui varient selon la variable et le niveau vertical. Comme pour la localisation horizontale, les fonctions de localisation verticale diagnostiquées ont un sommet plus plat que les fonctions de corrélation verticale. Leur amplitude et leur largeur augmentent aussi avec la taille de l'ensemble. Un ajustement de ces fonctions diagnostiquées serait certainement requis avant toute utilisation, en particulier car la formule 4.20 est précise à faible séparation, mais bruitée au-delà. On ne prouve ici que la possibilité d'estimer des fonctions de localisation verticale à partir de l'ensemble seul.

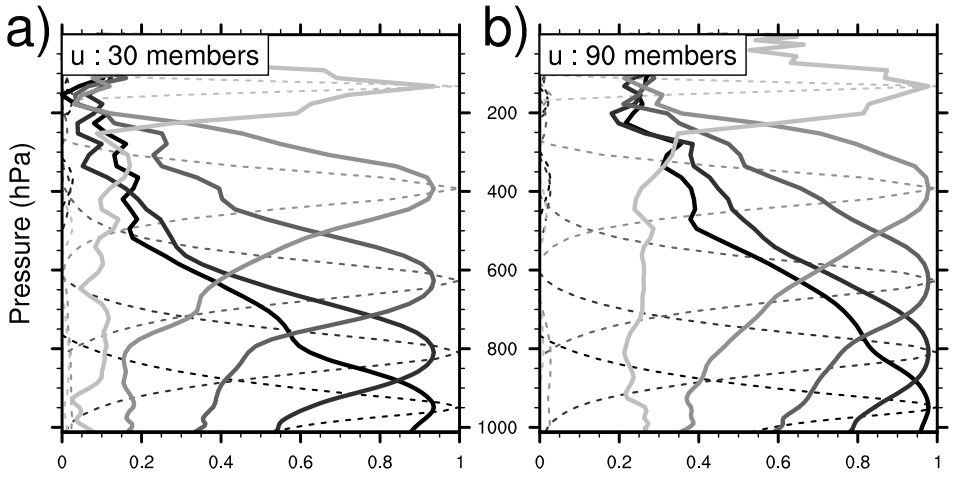


Figure 5.18. – Fonction de corrélation verticale diagnostiquée (tiretés) et fonction de localisation verticale diagnostiquée (trait plein) pour le vent zonal à différents niveaux (une couleur par niveau), pour des ensembles de 30 (a) et 90 membres (b). Les résultats sont donnés pour des prévisions issues du 3 novembre 2011 à 18 h UTC seulement.

6 | Utilisation des variances filtrées dans le 3D-Var d'AROME

La méthode de filtrage des variances d'erreur d'ébauche développée dans la section 4.1 ayant confirmé son efficacité pour le modèle AROME dans le chapitre 5, on cherche dans ce chapitre à étudier l'impact de l'utilisation de ces variances filtrées dans le 3D-Var AROME. On examine d'abord l'effet des variances hétérogènes sur les fonctions locales de covariance modélisée, y compris par comparaison avec les covariances estimées avec un grand ensemble. On évalue ensuite l'impact de l'utilisation des variances du jour, homogènes ou hétérogènes, sur le spin-up, sur les incréments d'analyse et sur les scores de prévision.

Sommaire

6.1	**Diagnostic des covariances d'erreur d'ébauche modélisées**	**123**
6.1.1	Cadre expérimental	123
6.1.2	Grandeurs diagnostiquées	125
6.1.3	Détail des covariances modélisées	127
6.1.4	Dépendance à l'écoulement	133
6.1.5	Conclusions	134
6.2	**Test d'impact sur une longue période**	**135**
6.2.1	Caractéristiques des simulations	135
6.2.2	Filtrage des variances du jour	136
6.2.3	Utilisation des variances filtrées	141
6.3	**Conclusions**	**152**

6.1. Diagnostic des covariances d'erreur d'ébauche modélisées

L'objectif de cette section est d'illustrer l'impact de l'introduction dans les autocovariances d'AROME de variances échantillonnées par un ensemble, potentiellement moyennées ou filtrées, et d'en évaluer la pertinence en comparant les covariances ainsi modélisées à des covariances échantillonnées par un grand ensemble . Les variances sont insérées dans la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ d'AROME de façon analogue à ARPEGE : l'écart-type moyen Σ_i de l'équation 2.5 est remplacé par la matrice diagonale $\mathbf{V}_i^{1/2}$, dont les coefficients diagonaux correspondent à la racine carrée des éléments du vecteur $\mathbf{v}$ des chapitres précédents.

6.1.1. Cadre expérimental

Configurations testées

On se base sur l'ensemble de 90 membres AEARO décrit au chapitre 2 pour estimer des variances d'erreur d'ébauche des variables non balancées. Ces variances sont introduites dans la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ d'AROME, dans plusieurs configurations résumées dans le tableau 6.1. Pour l'ensemble de grande taille (84 membres), les variances sont laissées brutes, car l'amplitude du bruit d'échantillonnage est suffisamment faible (cf. section 5.1.2). Pour le petit ensemble (6 membres), les variances sont soit brutes, soit filtrées par le filtre optimal utilisé dans le chapitre précédent, soit moyennées horizontalement. Afin de limiter la propagation horizontale excessive des covariances modélisées, parfois observée dans la suite, on utilise dans une

dernière configuration une version particulière de l'opérateur $\mathcal{H}$ (cf. section 2.1.2). Tandis que la régression spectrale reste inchangée, un masque est appliqué dans l'espace physique pour rendre l'opérateur à support compact (Guidard, 2007). Cela suppose l'introduction d'un paramètre arbitraire, contrôlant la taille du support, et fixé ici à 150 km. Dans cette configuration, on utilise les variances filtrées tirées du petit ensemble.

Table 6.1. – Configurations de variances testées avec l'ensemble du chapitre 2.

Configuration	Taille de l'ensemble	Filtrage spatial
"Averaged var."	6	Moyenne horizontale
"Raw var. (84)"	84	Non
"Raw var. (6)"	6	Non
"Filtered var. (6)"	6	Filtrage horizontal
"Filtered var.-CoSu (6)"	6	Filtrage horizontal Opérateur $\mathcal{H}$ à support compact

Écarts-types

Les coupes verticales des écarts-types d'erreur d'ébauche sont données par la figure 6.1, le long de la latitude 44.5°N pour les prévisions à 3 h d'échéance émises le 3 novembre 2011 à 18 h UTC (cf. cartes de la figure 5.5, colonne de gauche). On rappelle que pour ce cas, une ligne de fortes précipitations convectives traversait la France du nord au sud (cf. figure 2.8). La présence de ces précipitations explique la plus grande incertitude vers 3°E pour toutes les variables, et de façon particulièrement prononcée pour ζ et η_u. Le bruit d'échantillonnage est très net pour les variances non filtrées calculées à partir de 6 membres, et s'atténue grandement grâce au filtrage spatial. Ce dernier permet de conserver les structures de grande échelle des variances de référence (calculées à partir de 84 membres) mais lisse les structures de fine échelle. Enfin, l'utilisation d'un opérateur $\mathcal{H}$ à support compact laisse les variances de vorticité inchangées ($\mathcal{H}$ n'intervenant pas), modifie très légèrement celles de divergence non balancée, et change plus significativement les variances de température non balancée et d'humidité spécifique non balancée.

Les deux croix noires indiquent la position des points d'observation fictifs, qui vont permettre de détailler les covariances modélisées dans la suite. À l'est, il s'agit d'une zone convective intense, où les variances sont plus élevées que la moyenne horizontale. À l'ouest, il s'agit d'une zone plus calme, où les variances sont plutôt moins élevées que la moyenne horizontale.

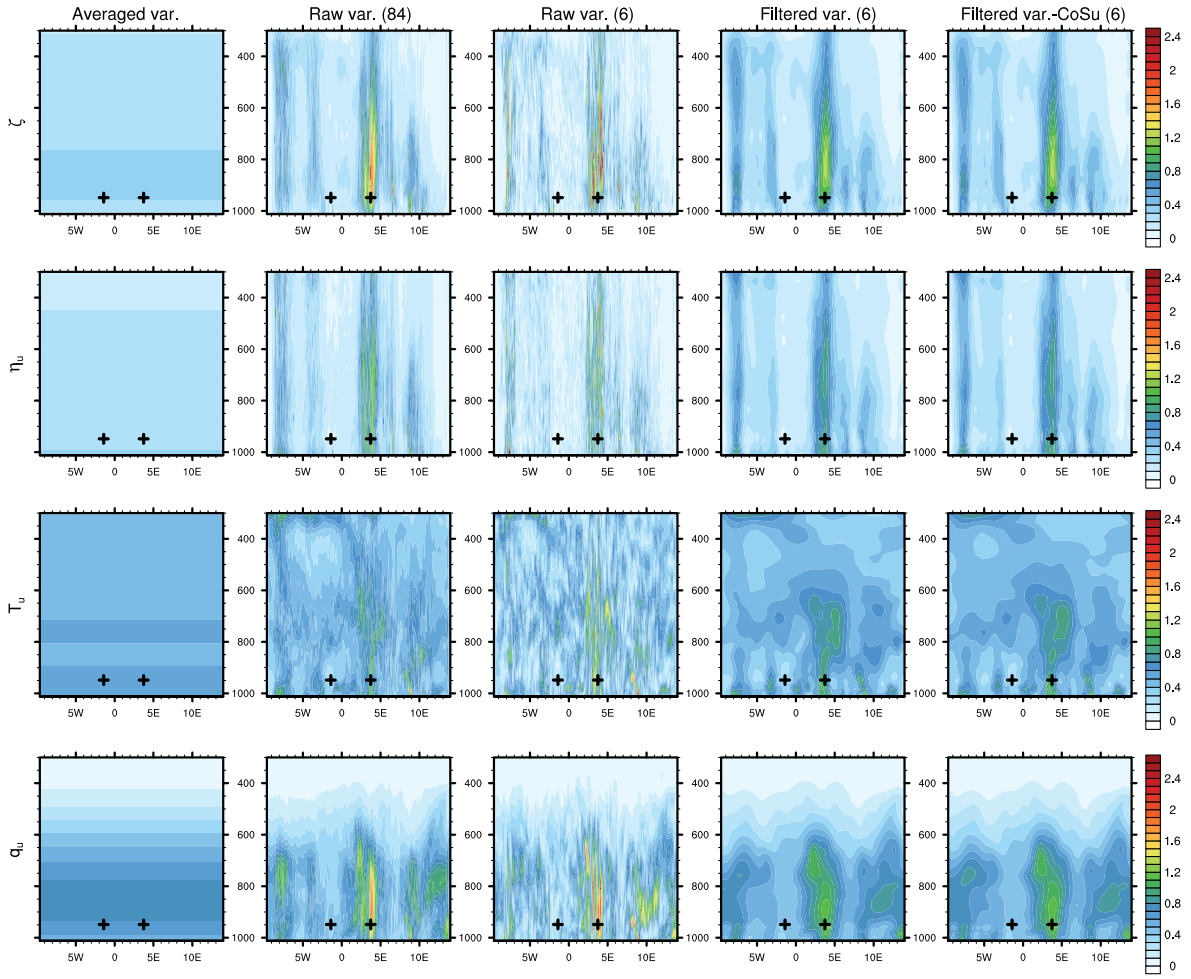


Figure 6.1. – Ecarts-types déduits des variances calculées dans différentes configurations (de gauche à droite, voir table 6.1), pour la vorticité, la divergence non balancée, la température non balancée et l'humidité spécifique non balancée (de haut en bas). Les prévisions à 3 h d'échéance sont émises le 3 novembre à 18 h UTC (unités respectives : $10^{-3}\mathrm{s}^{-1}$, $10^{-3}\mathrm{s}^{-1}$, K, $\mathrm{g.kg}^{-1}$).

6.1.2. Grandeurs diagnostiquées

Expériences à une observation

On souhaite étudier les structures des covariances d'erreur d'ébauche modélisées dans la matrice $\overline{\mathbf{B}}$. Afin de déterminer les covariances avec l'élément d'indice J du vecteur d'état $\mathbf{x}$, il suffit d'appliquer $\overline{\mathbf{B}}$ à un vecteur $\boldsymbol{\delta}$ dont le $J^{\text{ème}}$ élément vaut 1 et tous les autres sont nuls. La $J^{\text{ème}}$ colonne $\overline{\mathbf{b}}$ de $\overline{\mathbf{B}}$ est alors donnée par :

$$\overline{\mathbf{b}} = \overline{\mathbf{B}}\boldsymbol{\delta} \tag{6.1}$$

En pratique, seule $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}$ est implémentée dans le système d'assimilation, et il faut donc appliquer successivement $\overline{\mathbf{B}}^{\mathrm{T}/2}$ puis $\overline{\mathbf{B}}^{1/2}$ à $\boldsymbol{\delta}$.

Dans le cadre du BLUE (équation 1.10), si une seule observation est assimilée, il est pos-

sible de relier $\bar{\mathbf{b}}$ à l'incrément d'analyse $\delta\mathbf{x}^a$, dont on rappelle ici l'expression :

$$\delta\mathbf{x}^a = \overline{\mathbf{B}}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{H}\overline{\mathbf{B}}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \overline{\mathbf{R}}\right)^{-1}\left(\mathbf{y}^o - \mathbf{H}\mathbf{x}^b\right) \tag{6.2}$$

où les opérateurs $\mathbf{B}$ et $\mathbf{R}$ de l'équation 1.10 sont maintenant modélisés respectivement par $\overline{\mathbf{B}}$ et $\overline{\mathbf{R}}$. Si l'on impose un vecteur d'observation $\mathbf{y}^o$ constituée d'une unique observation y^o, correspondant à l'élément d'indice J du vecteur d'état $\mathbf{x}$, l'opérateur $\mathbf{H}$ se réduit à :

$$\mathbf{H} = \boldsymbol{\delta}^{\mathrm{T}} \tag{6.3}$$

Si on définit le vecteur $\overline{\boldsymbol{\sigma}}^b$ rassemblant les racines carrées des éléments diagonaux de $\overline{\mathbf{B}}$, la matrice $\mathbf{H}\overline{\mathbf{B}}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}$ est réduite à l'élément $(\bar{\sigma}^b_{\ J})^2$. La matrice $\overline{\mathbf{R}}$ est scalaire elle aussi et vaut $\overline{\mathbf{R}} = (\bar{\sigma}^o)^2$. On obtient alors :

$$\delta\mathbf{x}^a = \frac{d}{(\bar{\sigma}^b_{\ J})^2 + (\bar{\sigma}^o)^2}\bar{\mathbf{b}} \tag{6.4}$$

où d est l'innovation, scalaire également. On peut décomposer $\bar{\mathbf{b}}$ en :

$$\bar{\mathbf{b}} = \bar{\sigma}^b_{\ J}\ \overline{\boldsymbol{\sigma}}^b \circ \bar{\mathbf{c}} \tag{6.5}$$

où $\bar{\mathbf{c}}$ est le vecteur des corrélations modélisées avec l'élément d'indice J et $\circ$ indique un produit de Schur (élément par élément).

Dans la suite de cette section, seules les covariances normalisées $\bar{\mathbf{b}}/\bar{\sigma}^b_{\ J}$ sont tracées pour obtenir le produit $\overline{\boldsymbol{\sigma}}^b \circ \bar{\mathbf{c}}$, sans interférence supplémentaire de $\bar{\sigma}^b_{\ J}$. Les champs tracés ont donc la dimension physique de la partie de la variable d'état correspondante.

Cas du 3D-Var AROME

Dans le 3D-Var du modèle AROME, la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ est modélisée selon la méthode de Derber et Bouttier (1999), détaillée dans la section 2.1.2. Elle peut être représentée en blocs de covariances suivant les variables du vecteur d'état :

$$\overline{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{B}}(\zeta,\zeta) & \overline{\mathbf{B}}(\zeta,\eta) & \overline{\mathbf{B}}(\zeta,T) & \overline{\mathbf{B}}(\zeta,q) \\ \overline{\mathbf{B}}(\eta,\zeta) & \overline{\mathbf{B}}(\eta,\eta) & \overline{\mathbf{B}}(\eta,T) & \overline{\mathbf{B}}(\eta,q) \\ \overline{\mathbf{B}}(T,\zeta) & \overline{\mathbf{B}}(T,\eta) & \overline{\mathbf{B}}(T,T) & \overline{\mathbf{B}}(T,q) \\ \overline{\mathbf{B}}(q,\zeta) & \overline{\mathbf{B}}(q,\eta) & \overline{\mathbf{B}}(q,T) & \overline{\mathbf{B}}(q,q) \end{pmatrix} \tag{6.6}$$

Les blocs diagonaux, correspondant aux autocovariances, sont décomposés en :

$$\overline{\mathbf{B}}(\zeta,\zeta) = \overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta} \tag{6.7a}$$

$$\overline{\mathbf{B}}(\eta,\eta) = \mathcal{M}\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}(\mathcal{M}\mathcal{H})^{\mathrm{T}} + \overline{\mathbf{B}}_{s,\eta_u} \tag{6.7b}$$

$$\overline{\mathbf{B}}(T,T) = \mathcal{N}\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}(\mathcal{N}\mathcal{H})^{\mathrm{T}} + \mathcal{P}\overline{\mathbf{B}}_{s,\eta_u}\mathcal{P}^{\mathrm{T}} + \overline{\mathbf{B}}_{s,T_u} \tag{6.7c}$$

$$\overline{\mathbf{B}}(q,q) = \mathcal{Q}\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}(\mathcal{Q}\mathcal{H})^{\mathrm{T}} + \mathcal{R}\overline{\mathbf{B}}_{s,\eta_u}\mathcal{R}^{\mathrm{T}} + \mathcal{S}\overline{\mathbf{B}}_{s,T_u}\mathcal{S}^{\mathrm{T}} + \overline{\mathbf{B}}_{s,q_u} \tag{6.7d}$$

Les matrices $\overline{\mathbf{B}}_{s,\alpha_u}$ correspondent aux matrices d'autocovariance de la partie non balancée de la variable α. Dans la suite, on s'intéressera également au bloc non diagonal $\overline{\mathbf{B}}(q,T)$, donnant la covariance entre la température et l'humidité spécifique :

$$\overline{\mathbf{B}}(q,T) = \mathcal{Q}\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}(\mathcal{N}\mathcal{H})^{\mathrm{T}} + \mathcal{R}\overline{\mathbf{B}}_{s,\eta_u}\mathcal{P}^{\mathrm{T}} + \mathcal{S}\overline{\mathbf{B}}_{s,T_u} \tag{6.8}$$

Il faut noter que lorsque l'on trace les différents termes impliqués dans une covariance de ce type, la normalisation $\overline{\mathbf{b}}/\bar{\sigma}^b_J$ se fait en divisant par l'élément $\bar{\sigma}^b_J$ de la covariance totale, et non par celui de chaque terme individuel. Ainsi, la somme des termes normalisés reste égale à la covariance totale normalisée.

6.1.3. Détail des covariances modélisées

Autocovariance de vorticité

Comme le suggèrent respectivement les figures 2 de Montmerle et Berre (2010) et 5 de Brousseau *et al.* (2011), l'autocovariance de vorticité $\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}$ a une portée horizontale très courte. Cependant, sa portée verticale est assez proche de celle des autres variables, ce que l'on retrouve dans la figure 6.2. On constate que ses maxima sont cohérents avec les valeurs de la figure 6.1 :

— Le point d'observation à l'est se trouve dans une zone de très forte variance pour les variances brutes à 84 membres. Pour les variances brutes à 6 membres, il se trouve juste à côté, d'où l'écart significatif.

— Au point d'observation à l'ouest, les maxima de $\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}$ sont plus faibles dans les cas où les variances sont hétérogènes spatialement que dans le cas où elles sont moyennées. On constate aussi la présence de maxima locaux de covariance à grande séparation, dans les zones où les variances sont très fortes (en particulier pour les variances brutes à 6 membres). Même si la corrélation à cette séparation est faible, elle est compensée par un écart-type très fort, jusqu'à 34 fois supérieur à l'écart-type au point d'observation pour les variances brutes à 6 membres ($2{,}68.10^{-3}$ s^{-1} au maximum contre $7{,}82.10^{-5}$ s^{-1} au point d'observation).

L'opérateur $\mathcal{H}$ n'intervient pas ici, ce qui explique que les configurations "Filtered var." et "Filtered var.-CoSu" donnent des résultats identiques.

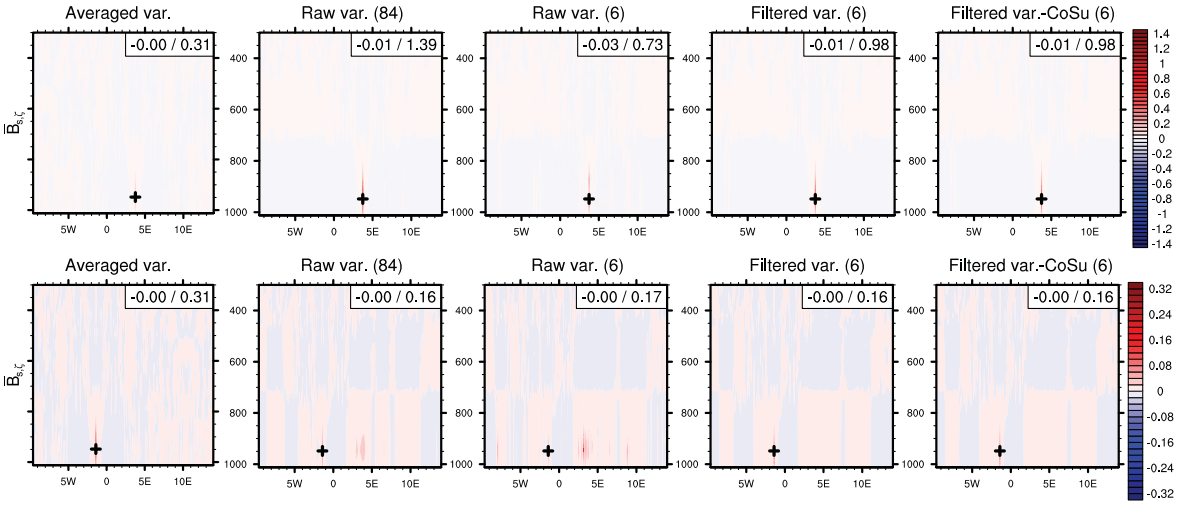


Figure 6.2. – Autocovariance normalisée de vorticité (unité : 10^{-3} s^{-1}), et ses extrema.

Autocovariance de masse totale linéarisée

Comme le montre la figure 6.3, l'autocovariance de la masse totale linéarisée $\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}\mathcal{H}^{\mathrm{T}}$ a des portées horizontales considérablement plus longues que celles de $\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}$ seule. Ceci est dû à la

nature de l'opérateur $\mathcal{H}$, explicitée dans l'équation 2.3 : si l'on néglige les variations en latitude du paramètre de Coriolis ($f \simeq f_0$), le champ de masse en équilibre géostrophique est donné par :

$$\delta P_t \simeq f_0 \nabla^{-2} \delta\zeta \tag{6.9}$$

Or l'application du Laplacien inverse ∇^{-2} correspond à une double intégration spatiale, ce qui favorise les grandes échelles au détriment des petites.

En comparant les configurations "Filtered var." et "Filtered var.-CoSu" pour le point d'observation à l'est, l'impact de la restriction de $\mathcal{H}$ à un support compact est net. Comme attendu, l'extension horizontale de $\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}\mathcal{H}^{\mathrm{T}}$ est très réduite, tandis que son amplitude à l'endroit de l'observation n'est quasiment pas modifiée.

Pour le point d'observation à l'ouest, les variances hétérogènes introduisent des maxima locaux de $\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}$, notés au paragraphe précédent. Ceci change radicalement la structure de $\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}\mathcal{H}^{\mathrm{T}}$, avec l'apparition d'un maximum local très important à l'endroit de ce maximum de variance, à grande distance du point d'observation. Ce maximum local devient même le maximum global pour les variances brutes à 84 et 6 membres. L'application du support compact pour $\mathcal{H}$ réduit fortement l'amplitude des covariances, en particulier celle du maximum secondaire.

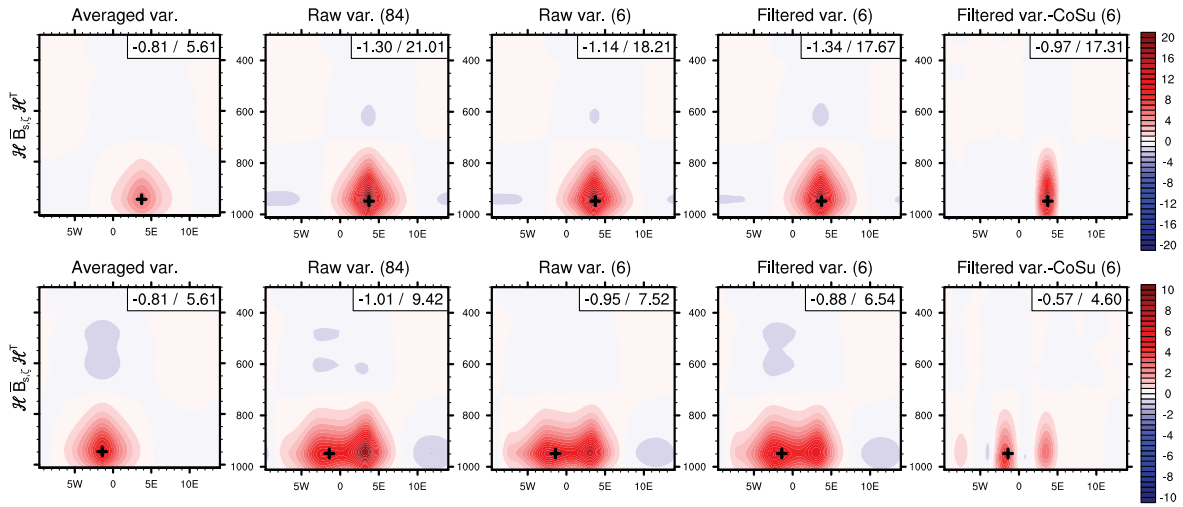


Figure 6.3. – Autocovariance normalisée de masse totale linéarisée (unité : $\mathrm{m}^2.\mathrm{s}^{-2}$), et ses extrema.

Dans la suite de cette section, seules les covariances modélisées au point d'observation à l'ouest sont montrées, car ce sont elles qui expriment le mieux l'effet des variances hétérogènes.

Autocovariance de divergence

De même que pour la vorticité, les écarts-types de divergence non balancée présentent des variations très importantes pour les variances brutes (figure 6.1). Pour les mêmes raisons, on retrouve donc des minima et maxima importants à grande séparation dans $\overline{\mathbf{B}}_{s,\eta_u}$, comme on peut le constater sur la figure 6.4. On remarque aussi que la structure horizontale de $\overline{\mathbf{B}}_{s,\eta_u}$ est proche de celle de $\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}$, avec des portées très courtes. Cependant, sa structure verticale est différente : elle présente un lobe négatif situé au-dessus du point d'observation. Ceci correspond physiquement au fait que la divergence est à peu près conservée au sein d'une colonne atmosphérique donnée : toute convergence doit être compensée par une divergence.

Le poids relatif des différentes composantes de l'autocovariance de divergence (équation 6.7b) varie clairement d'une configuration à l'autre. Le poids de la composante multivariée $\mathcal{MH}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}(\mathcal{MH})^{\mathrm{T}}$ liée à la vorticité est ainsi très faible dans le cas de variances homogènes (inférieur ici à 4 %), et reste assez faible pour des variances hétérogènes filtrées ($\sim$ 10 %). Pour des variances hétérogènes brutes, ce poids augmente sensiblement. Ceci rappelle le comportement de $\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}\mathcal{H}^{\mathrm{T}}$, dont l'amplitude suivait la même tendance.

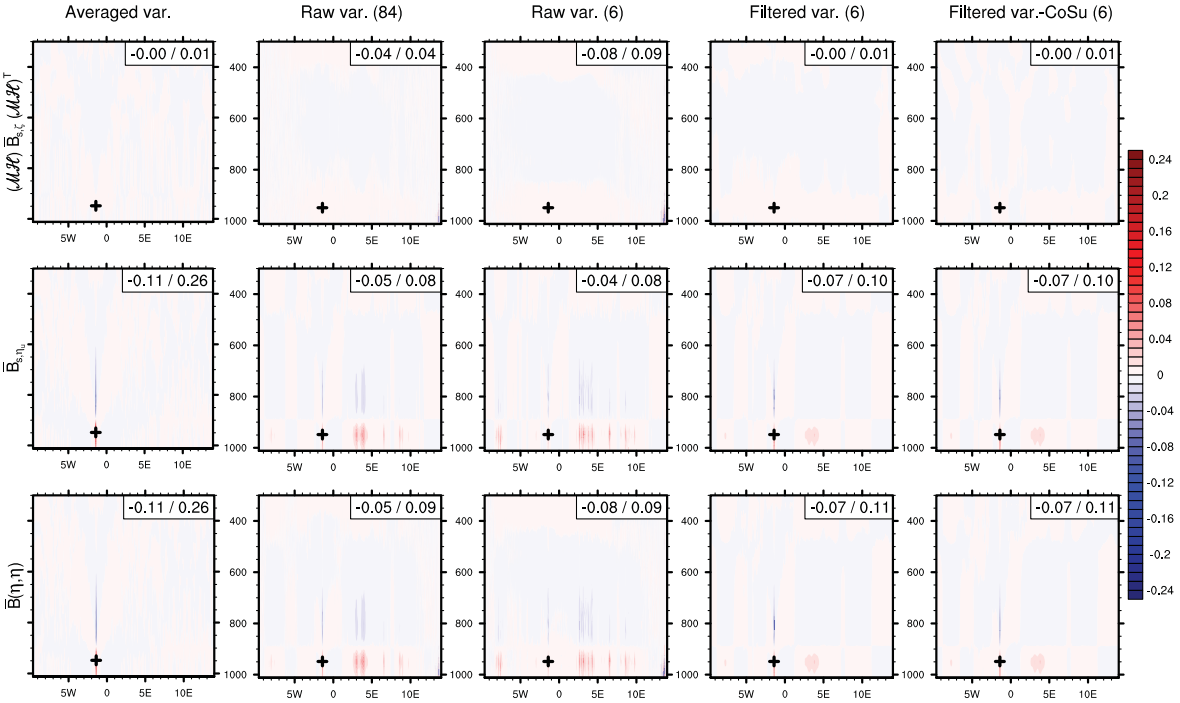


Figure 6.4. – Autocovariance normalisée de divergence et ses composantes (unité : 10^{-3} s^{-1}), ainsi que leurs extrema.

Autocovariance implicite de vent méridien

À partir des autocovariances modélisées de vorticité et de divergence, il est possible de déduire les autocovariances implicites de vents zonal et méridien. La figure 6.5 montre que l'hétérogénéité des variances spécifiées se manifeste par une augmentation de la composante multivariée de l'autocovariance de vent méridien, d'autant plus forte que les variances sont hétérogènes. Dans le cas des variances brutes à 6 membres, ce terme à une amplitude plus de 15 fois plus importante que dans le cas des variances homogènes (1,26 $\mathrm{m.s}^{-1}$ contre 0,08 $\mathrm{m.s}^{-1}$), des structures de forte amplitude se propageant en altitude, probablement en raison des corrélations verticales spectrales de l'opérateur $\mathcal{M}$. L'apport du filtrage des variances est décisif, car il permet de diminuer largement ces effets (rapport des amplitudes réduit à 2,75 : 0,22 $\mathrm{m.s}^{-1}$ contre 0,08 $\mathrm{m.s}^{-1}$). La composante multivariée reste dans tous les cas dominée par la composante univariée. Cette dernière subit également une modification de sa structure spatiale, avec une propagation vers l'est du lobe positif, suivi d'une forte diminution et d'un lobe négatif au passage de la zone de fortes variances. L'hétérogénéité des variances spécifiées a donc tendance dans ce cas à allonger de façon significative la portée des covariances modélisées de vent méridien.

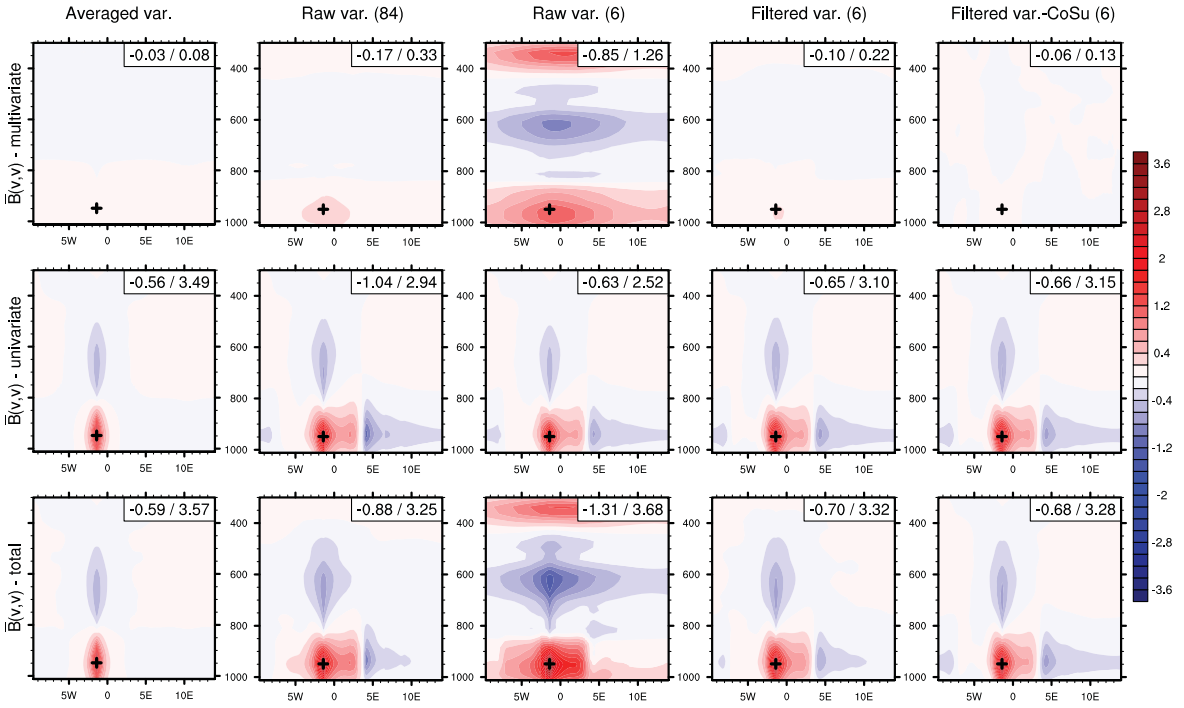


Figure 6.5. – Autocovariance normalisée de vent méridien : composante multivariée, composante univariée, autocovariance totale (unité : $\mathrm{m.s}^{-1}$), ainsi que leurs extrema.

Autocovariance de température

La figure 6.6 donne les différentes composantes de l'autocovariance de température $\overline{\mathbf{B}}(T,T)$, rappelées dans l'équation 6.7c. Les changements de structure des covariances modélisées de vorticité et de divergence non balancée dus aux variances spécifiées ont un impact très important sur les composantes multivariées de $\overline{\mathbf{B}}(T,T)$. Ils en modifient fortement la structure et augmentent leur amplitude, même si les variances des variables non balancées sont localement faibles. Le problème se pose donc pour le terme $\mathcal{N}\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}(\mathcal{N}\mathcal{H})^{\mathrm{T}}$ et pour dans une moindre mesure pour le terme $\mathcal{P}\overline{\mathbf{B}}_{s,\eta_u}\mathcal{P}^{\mathrm{T}}$, car le couplage de la température avec la divergence non balancée est plus faible que celui avec la masse totale linéarisée. On note que les poids relatifs des composantes multivariées ($\mathcal{N}\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}(\mathcal{N}\mathcal{H})^{\mathrm{T}} + \mathcal{P}\overline{\mathbf{B}}_{s,\eta_u}\mathcal{P}^{\mathrm{T}}$) et univariées ($\overline{\mathbf{B}}_{s,T_u}$) dans $\overline{\mathbf{B}}(T,T)$ sont modifiés selon les variances spécifiées. L'utilisation des variances hétérogènes semble augmenter systématiquement le poids des composantes multivariées, qui dominent l'autocovariance totale dans les cas les plus bruités.

Comme précédemment, ce problème est particulièrement marqué pour les variances brutes à 6 membres, et semble s'atténuer nettement avec le filtrage des variances, dont le résultat se rapproche toujours fortement de la référence à 84 membres. L'impact du support compact pour l'opérateur $\mathcal{H}$ est très net, limitant la propagation des structures de $\mathcal{N}\mathcal{H}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}(\mathcal{N}\mathcal{H})^{\mathrm{T}}$.

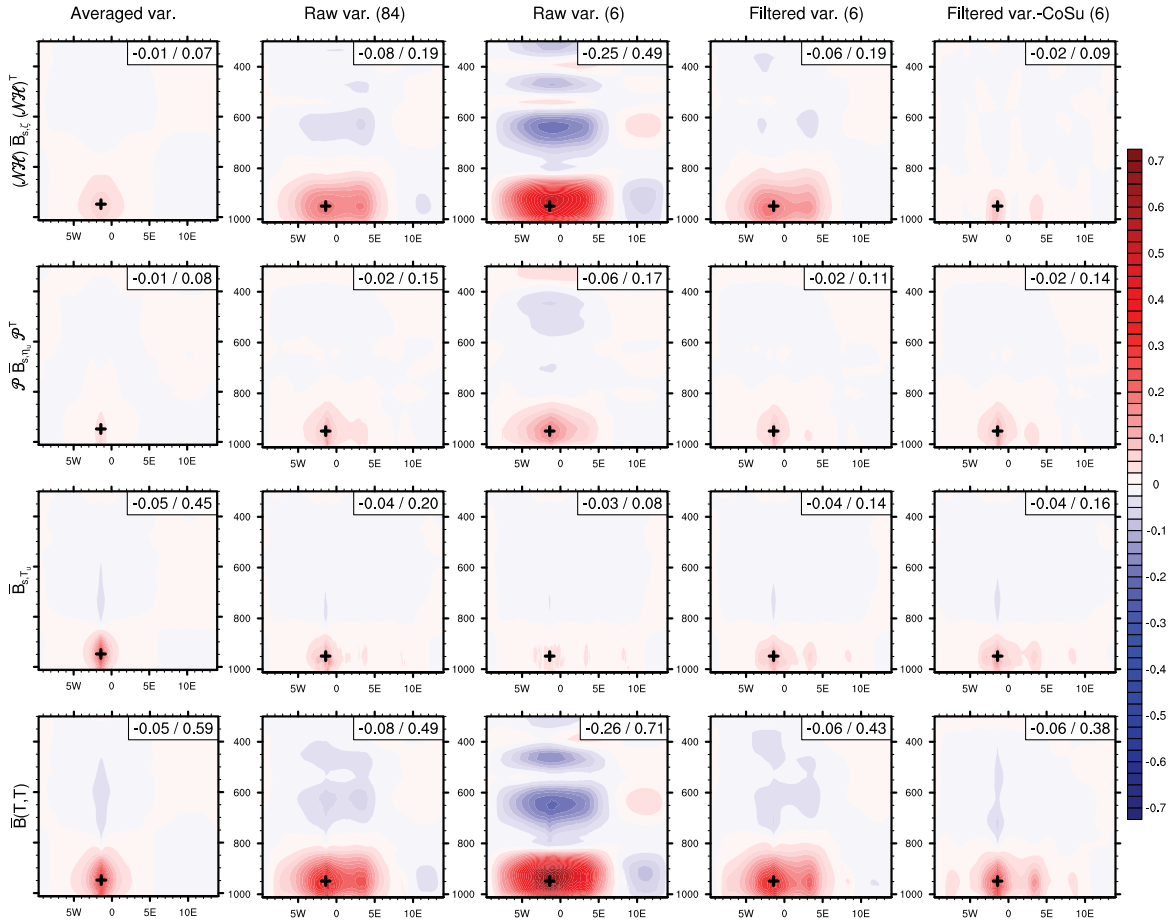


Figure 6.6. – Autocovariance normalisée de température et ses composantes (unité : K), ainsi que leurs extrema.

Autocovariance d'humidité spécifique

Le détail de l'autocovariance d'humidité spécifique (équation 6.7d) est donné par la figure 6.7. On constate que le couplage entre les variables dynamiques (vorticité et divergence) et l'humidité spécifique est très faible pour des variances homogènes. Ceci s'explique très probablement par le faible nombre d'échantillons précipitants comparativement au nombre d'échantillons total utilisé pour calibrer la matrice $\overline{\mathbf{B}}$. Pour des covariances calculées spécifiquement dans les précipitations, Montmerle et Berre (2010) ont en effet montré un fort couplage entre ces variables reflétant la dynamique des systèmes convectifs. Dans le cas présent, la principale composante multivariée provient donc de la température, avec le terme $\mathcal{S}\overline{\mathbf{B}}_{s,T_u}\mathcal{S}^{\mathrm{T}}$.

Pour des variances hétérogènes, on observe comme pour la température que les composantes multivariées ont un poids plus important dans la matrice $\overline{\mathbf{B}}(q,q)$, d'autant plus que les variances spécifiées sont bruitées. Ainsi, pour les variances brutes à 6 membres, le poids de toutes les composantes multivariées semble largement surestimé et l'extension verticale et horizontale des covariances modélisées parait également excessive. Cela signifie que le problème mentionné précédemment d'interaction entre les balances spectrales et des variances très hétérogènes ne se limite pas aux variables dynamiques, mais touche toutes les régressions. Toutefois, les variances brutes de T_u étant de plus grande échelle que celles de ζ et η_u, cette interaction est moins flagrante pour $\mathcal{S}\overline{\mathbf{B}}_{s,T_u}\mathcal{S}^{\mathrm{T}}$ que pour $\mathcal{QH}\overline{\mathbf{B}}_{s,\zeta}(\mathcal{QH})^{\mathrm{T}}$ et $\mathcal{R}\overline{\mathbf{B}}_{s,\eta_u}\mathcal{R}^{\mathrm{T}}$

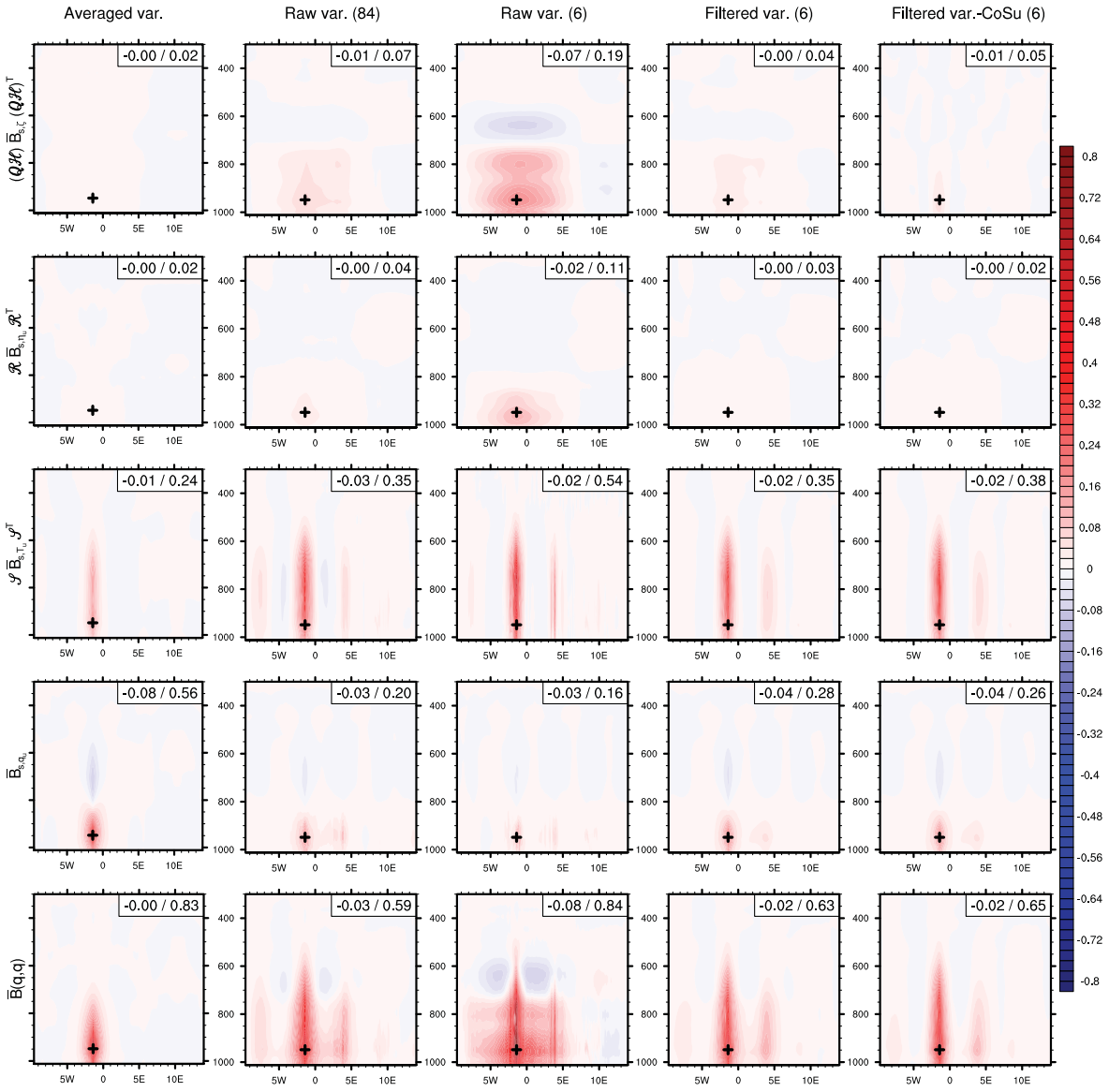


Figure 6.7. – Autocovariance normalisée d'humidité spécifique et ses composantes (unité : $g.kg^{-1}$), ainsi que leurs extrema.

Covariance croisée température/humidité spécifique

La covariance croisée de température et d'humidité spécifique fait intervenir de nombreux opérateurs de régression, comme le montre l'équation 6.8. Il n'est donc pas étonnant que les interactions entre ces opérateurs et les variances hétérogènes décrites dans les paragraphes précédents s'y retrouvent, comme le montre la figure 6.8. Dans le cas où les variances sont homogènes horizontalement, on observe un minima au niveau de l'observation, et un maxima très faible juste au-dessus. Lorsque les variances sont hétérogènes spatialement, la structure de la covariance croisée est complètement modifiée : des maxima très importants apparaissent, et la géométrie du minimum change radicalement, au point de disparaitre dans certains cas. On note également de fortes propagations horizontales dans le cas non filtré à 6 membres.

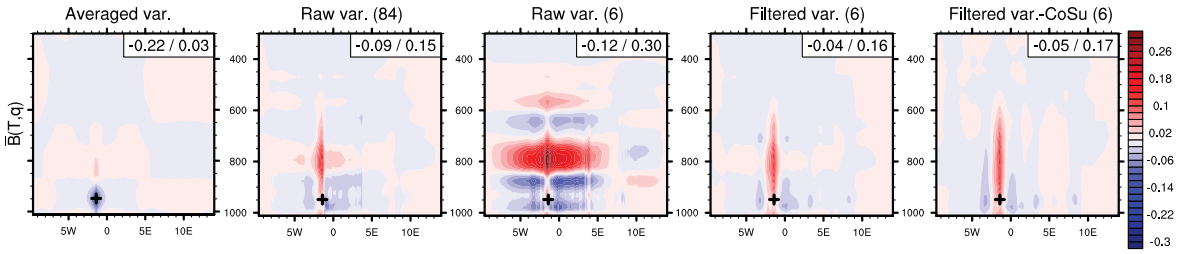


Figure 6.8. – Covariance croisée normalisée de température (au point d'observation) et d'humidité spécifique (unité : g.kg^{-1}), et ses extrema.

6.1.4. Dépendance à l'écoulement

La comparaison des matrices $\overline{\mathbf{B}}$ incluant des variances hétérogènes ou non montre des différences qui vont au-delà de la simple modulation locale d'amplitude. Les portées horizontales, voire verticales, sont augmentées, et un poids plus important est mis sur les composantes multivariées. Dans cette section, on compare à présent les covariances modélisées utilisant des variances hétérogènes (matrice $\overline{\mathbf{B}}$) à des covariances totales échantillonnées directement à partir du même grand ensemble (matrice $\widetilde{\mathbf{B}}$).

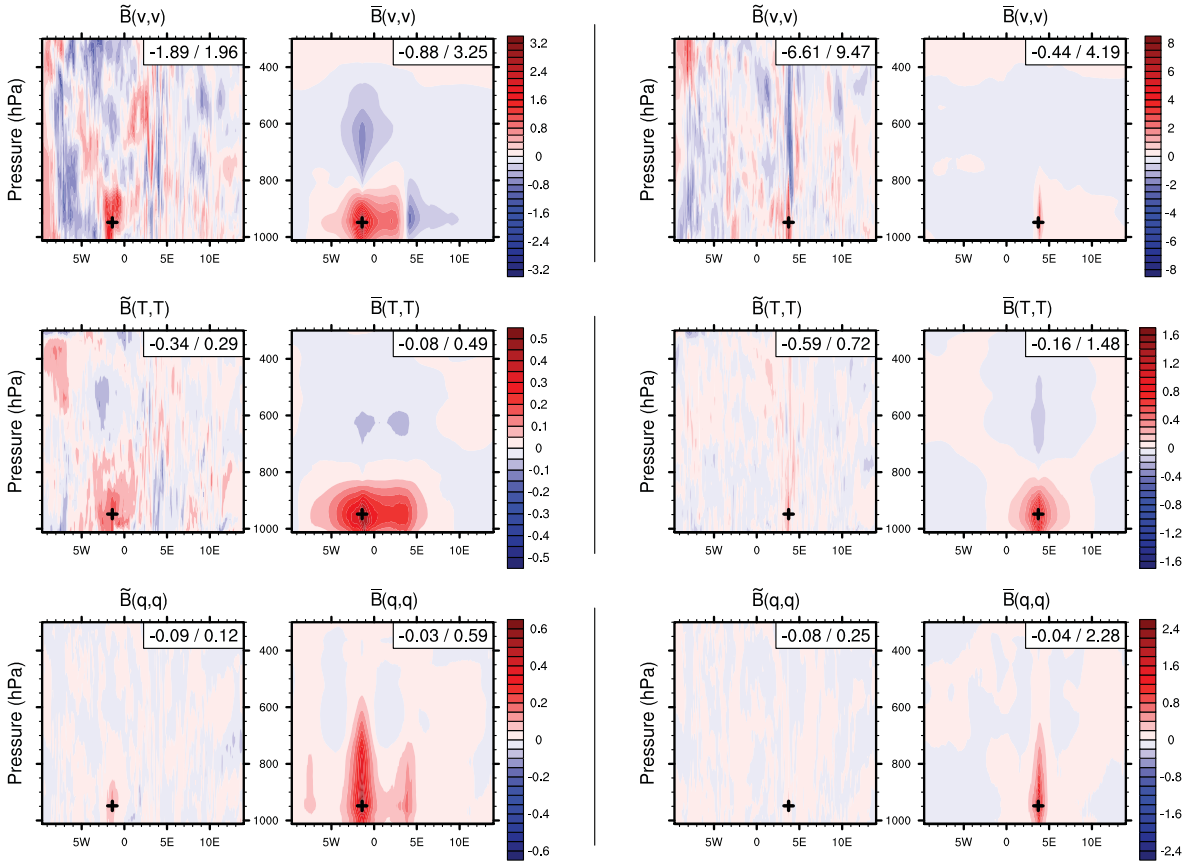


Figure 6.9. – Autocovariance normalisée échantillonnée directement à partir de l'ensemble à 90 membres ($\widetilde{\mathbf{B}}$) et modélisée en incluant des variances brutes à 84 membres($\overline{\mathbf{B}}$) pour le vent méridien, la température et l'humidité spécifique (de haut en bas, unités respectives : m.s^{-1}, K et g.kg^{-1}), et leurs extrema.

La figure 6.9 montre cette comparaison pour l'autocovariance implicite de vent zonal (rangée supérieure). Les différences entre les covariances modélisées à l'est et à l'ouest du domaine reflètent en partie la dépendance à l'écoulement indiquée par le grand ensemble. Le caractère localisé de la covariance à l'est reflète l'influence des zones convectives de petite échelle sur la matrice $\mathbf{B}$. Outre l'aspect bruité des covariances échantillonnées, on peut noter l'accord relatif entre ces dernières et les covariances modélisées concernant leur structure spatiale (plus étendue à l'ouest et plus resserrée à l'est). Cependant, leurs amplitudes montrent des différences importantes, de l'ordre d'un facteur 2, dont le sens change entre l'est et l'ouest. Pour la température, la figure 6.9 (rangée du milieu) montre que les structures spatiales des covariances échantillonnées et modélisées sont très différentes, et que les amplitudes semblent systématiquement plus fortes pour les covariances modélisées, d'un facteur 2 également. Pour l'humidité spécifique, la figure 6.9 (rangée inférieure) montre des disparités encore plus grandes pour la structure spatiale comme pour l'amplitude. Pour le point d'observation situé à l'est, l'amplitude des covariances modélisées est par exemple plus de 9 fois plus forte dans celle des covariances échantillonnées (respectivement 2,28 g.kg^{-1} et 0,25 g.kg^{-1}).

Ces figures illustrent un autre aspect des différences pour la représentation des covariances d'erreur d'ébauche entre une approche purement ensembliste et une autre basée sur un modèle : la première produit des covariances très localisées (l'ajout d'une localisation renforcerait ce constat), fortement dépendantes de l'écoulement, la seconde modélise des covariances lisses, plus étendues, avec une dépendance à l'écoulement moins marquée.

6.1.5. Conclusions

Dans cette section, différents champs de variance d'erreur d'ébauche ont été diagnostiqués pour les variables non balancées, puis utilisés dans la modélisation de plusieurs matrices $\overline{\mathbf{B}}$. Tous les termes des principaux blocs constituant ces matrices ont ensuite été comparés avec un point d'observation caractérisé par de faibles variances, et dans certains cas avec un autre point d'observation caractérisé par des variances plus fortes. Dans les deux cas de figure, l'impact des variances hétérogènes sur les covariances modélisées va au-delà de simples modifications locales d'amplitude. Comparativement au cas où $\overline{\mathbf{B}}$ est modélisée avec des variances homogènes, les covariances produites montrent en effet des amplitudes et des structures fortement différentes, y compris parfois à grande distance du point d'observation considéré. Il faut noter que le bruit d'échantillonnage pourrait aussi affecter les régressions spectrales de l'opérateur de balance, comme cela a déjà été mentionné par Derber et Bouttier (1999) et confirmé par Fisher *et al.* (2009), ce qui pourrait amplifier l'effet des interactions défavorables entre variances hétérogènes et balances.

L'application du filtrage homogène présenté précédemment sur les variances brutes permet de diminuer fortement le bruit d'échantillonnage des variances, ce qui réduit aussi ces artefacts. On obtient ainsi à moindre coût des covariances équivalentes à celles obtenues en utilisant des variances asymptotiques tirées d'un grand ensemble.

La matrice $\overline{\mathbf{B}}$ modélisée en incluant des variances hétérogènes issues du grand ensemble (donc peu bruitées) est cependant assez différente en termes d'amplitude et de portée de la matrice directement échantillonnée.

6.2. Test d'impact sur une longue période

La section précédente a illustré certaines limitations de la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ modélisée utilisant des variances hétérogènes. Cependant, cette matrice $\overline{\mathbf{B}}$ comporte tout de même une composante dépendant de l'écoulement et il est intéressant de poursuivre son évaluation dans le 3D-Var AROME. Pour cela, une assimilation d'ensemble AEARO à 6 membres a été conduite pendant une période de 6 semaines à l'automne 2012. Dans cette section, le cadre expérimental est brièvement décrit avant une discussion sur le comportement du filtrage des variances et sa dépendance à l'écoulement, pour conclure enfin avec les scores obtenus par des configurations utilisant de façons différentes les variances de l'ensemble.

6.2.1. Caractéristiques des simulations

Événements météorologiques

La période retenue pour les tests, du 11 octobre au 21 novembre 2012, entre dans le cadre du projet "Hydrological cycle in Mediterranean Experiment" (HyMeX, Drobinski *et al.* (2013)). Le début de la période est en particulier concomitant avec la première "Special Observation Period" (SOP-1, Ducrocq *et al.* (2013)), qui a eu lieu du 5 septembre au 6 novembre 2012.

Cette période est caractérisée par plusieurs événements de fortes précipitations à contextes synoptiques différents, comme le montre la figure 6.10 pour les 19 octobre, 26 octobre et 10 novembre 2012. Des cas de fronts précipitants, d'épisodes cévenols ou de convection isolée ont en effet été observés. Une telle alternance de régimes de temps calmes et agités permet de tester les modifications apportées au système d'assimilation dans une grande variété de situations.

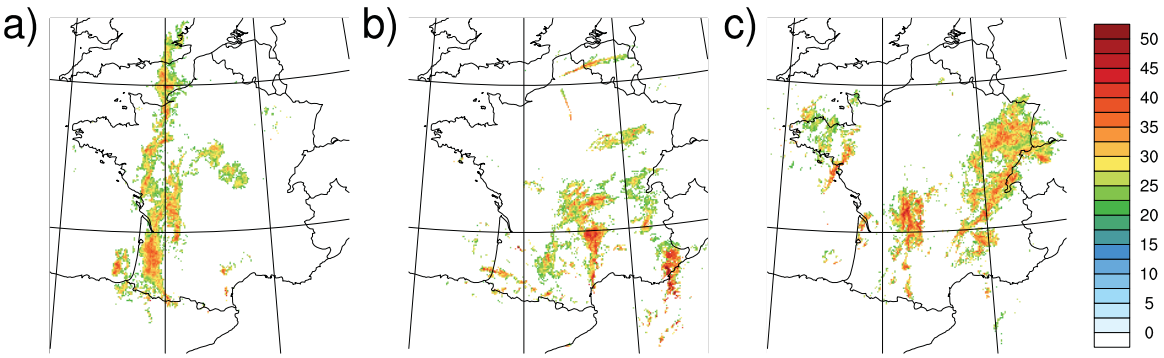


Figure 6.10. – Réflectivité radar du réseau ARAMIS (unité : dBZ), le 19 octobre 2012 à 12 h UTC (a), le 26 octobre 2012 à 15 h UTC (b) et le 10 novembre 2012 à 6 h UTC (c).

Description de l'ensemble

Le système d'assimilation utilisé pour cette expérience est très proche de celui décrit dans le chapitre 2. Les 6 membres de l'AEARO sont couplés aux 6 membres de l'AEARP opérationnelle. Il faut noter que dans cette dernière et à cette date, les corrélations d'erreur d'ébauche des variables non balancées ne sont plus climatologiques et homogènes, mais dépendantes de l'écoulement et hétérogènes grâce à une formulation en ondelettes recalculée de façon journalière (Varella *et al.*, 2011).

La différence principale pour l'AEARO consiste en l'ajout d'une inflation $\bar{\lambda}$ des perturbations dans le but d'améliorer la dispersion de l'ensemble. Cette inflation a donc une influence

directe sur l'amplitude des variances calculées à partir de l'ensemble. Implémentée par Laure Raynaud (CNRM/GMAP), la méthode utilisée pour calculer l'inflation dans l'AEARO est différente de celle utilisée pour l'AEARP (Raynaud *et al.*, 2012), puisqu'elle se base sur la formule :

$$\bar{\lambda} = \frac{\mathrm{Tr}\left(\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}]\right)}{\mathrm{Tr}\left(\widetilde{\mathbf{B}}\right)} \tag{6.10}$$

où $\boldsymbol{\varepsilon}$ est la différence entre la moyenne d'ensemble des prévisions perturbées et l'analyse d'un cycle d'assimilation non perturbé, tous deux valides au même instant : $\boldsymbol{\varepsilon} = \langle \widetilde{\mathbf{x}}^b \rangle - \mathbf{x}^a$. Les propriétés théoriques de cette estimation sont détaillées dans l'annexe A.6. Dans la version implémentée pour l'AEARO, une hypothèse d'ergodicité spatiale permet de remplacer les espérances de l'équation 6.10 par des moyennes horizontales sur tout le domaine :

$$\bar{\lambda} \simeq \frac{\mu^S(\boldsymbol{\varepsilon} \circ \boldsymbol{\varepsilon})}{\mu^S(\widetilde{\mathbf{v}})} \tag{6.11}$$

Une moyenne verticale est également effectuée, sur trois couches atmosphériques correspondant à peu près à la basse troposphère, la moyenne troposphère et la haute troposphère/stratosphère. Un profil d'inflation affine par morceaux est ensuite reconstitué à partir de ces trois valeurs. L'inflation est ainsi estimée pour une seule variable (la température), puis appliquée à toutes les variables. L'objectif de ce schéma est de préserver au maximum les équilibres du système, qui seraient perturbés si l'inflation changeait trop fortement selon la variable et selon le niveau.

On constate dans la figure 6.11 que l'inflation estimée est assez stable dans le temps, qu'elle oscille entre 1 et 1,3 dans la troposphère, mais qu'elle est inférieure à 1 dans la partie supérieure du modèle. Ceci peut s'expliquer par la relaxation spectrale du modèle AROME vers le coupleur ARPEGE au sommet du premier. Ainsi, dans les niveaux les plus élevés :

- $\mu^S(\widetilde{\mathbf{v}})$ devrait donner une estimation ensembliste de la variance moyenne des coupleurs perturbés de l'AEARP,
- $\mu^S(\boldsymbol{\varepsilon} \circ \boldsymbol{\varepsilon})$ devrait donner une estimation spatiale (par l'hypothèse d'ergodicité) de la variance moyenne de l'ébauche ARPEGE (à quelques modulations près indiquées précédemment).

Cependant, ce dernier terme est calculé après interpolation sur la grille AROME. La maille de la grille AROME étant nettement plus fine que celle d'ARPEGE, ceci conduit à une sous-estimation de $\mu^S(\boldsymbol{\varepsilon} \circ \boldsymbol{\varepsilon})$.

6.2.2. Filtrage des variances du jour

Comportement des variances

Les variances des variables non balancées sont calculées à chaque cycle d'assimilation à partir de l'ensemble de 6 membres. La racine carrée du profil des variances moyennes et ses variations temporelles sont indiquées sur la figure 6.12. De manière analogue à ce qui avait déjà été montré par Brousseau *et al.* (2012), on constate des variations assez importantes de variance moyenne, qui étaient toutefois attendues en raison des changements de régime de temps. Par exemple, les valeurs maximales pour les variables dynamiques sont probablement liées à la présence de précipitations (Montmerle et Berre, 2010).

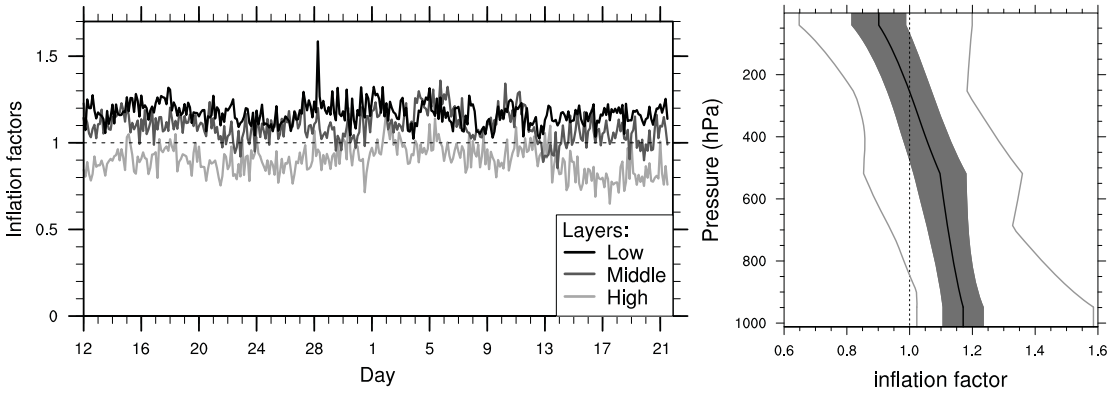


Figure 6.11. – À gauche : coefficients d'inflation appliqués à l'AEARO de 6 membres du 12 octobre au 21 novembre 2011, et moyennés horizontalement pour trois couches atmosphériques : basse troposphère, moyenne troposphère et haute-troposphère/stratosphère. À droite : inflation modélisée en moyenne temporelle (trait plein noir), écarts-types (zone grisée) et extrema (traits pleins gris).

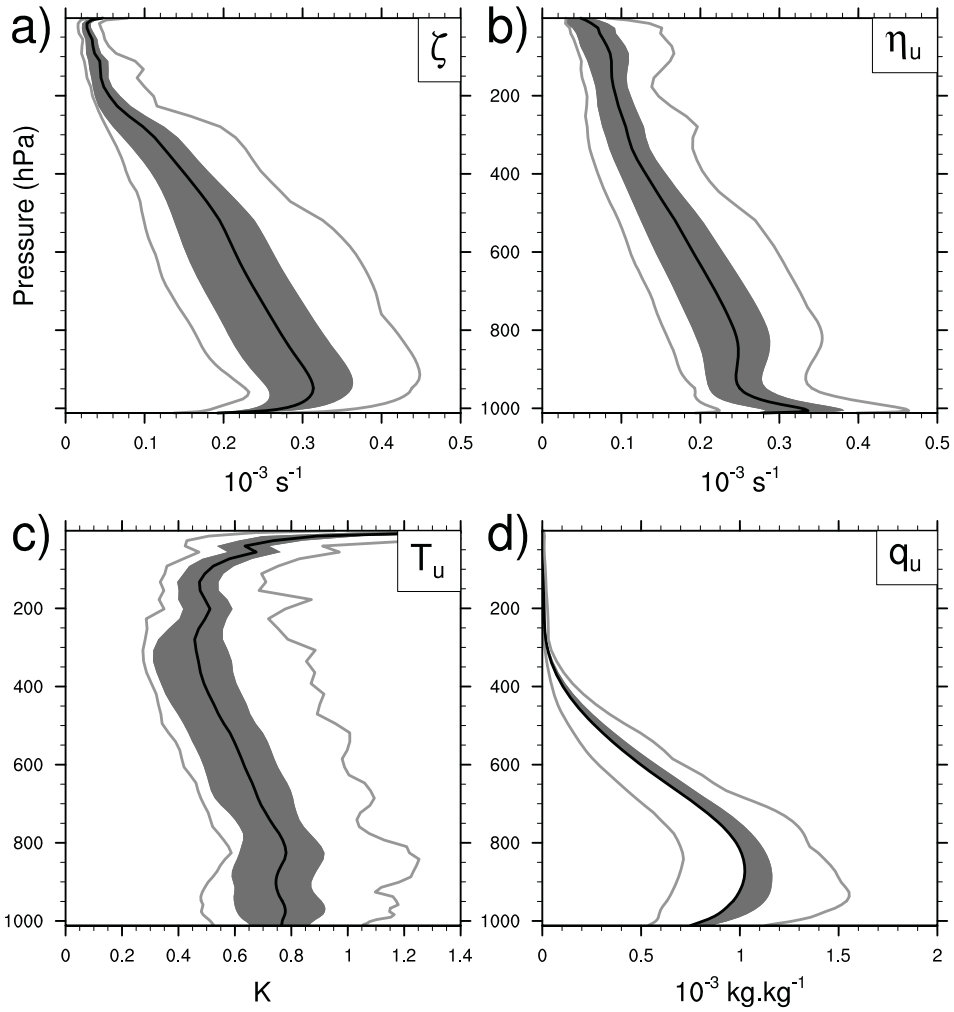


Figure 6.12. – Racine carrée de la moyenne horizontale des variances brutes : moyenne temporelle (trait plein noir), écarts-types (zone grisée) et extrema (traits pleins gris), pour la vorticité (a), la divergence non balancée (b), la température non balancée (c) et l'humidité spécifique non balancée (d).

Un autre point intéressant concerne la variance spatiale des variances brutes ou filtrées, moyennées temporellement. La figure 6.13 en montre la racine quatrième de manière à ce que la dimension reste celle du champ initial. L'effet du filtrage est très net : il réduit la variance spatiale de la variance à tous les niveaux et pour toutes les variables, dans des proportions assez similaires.

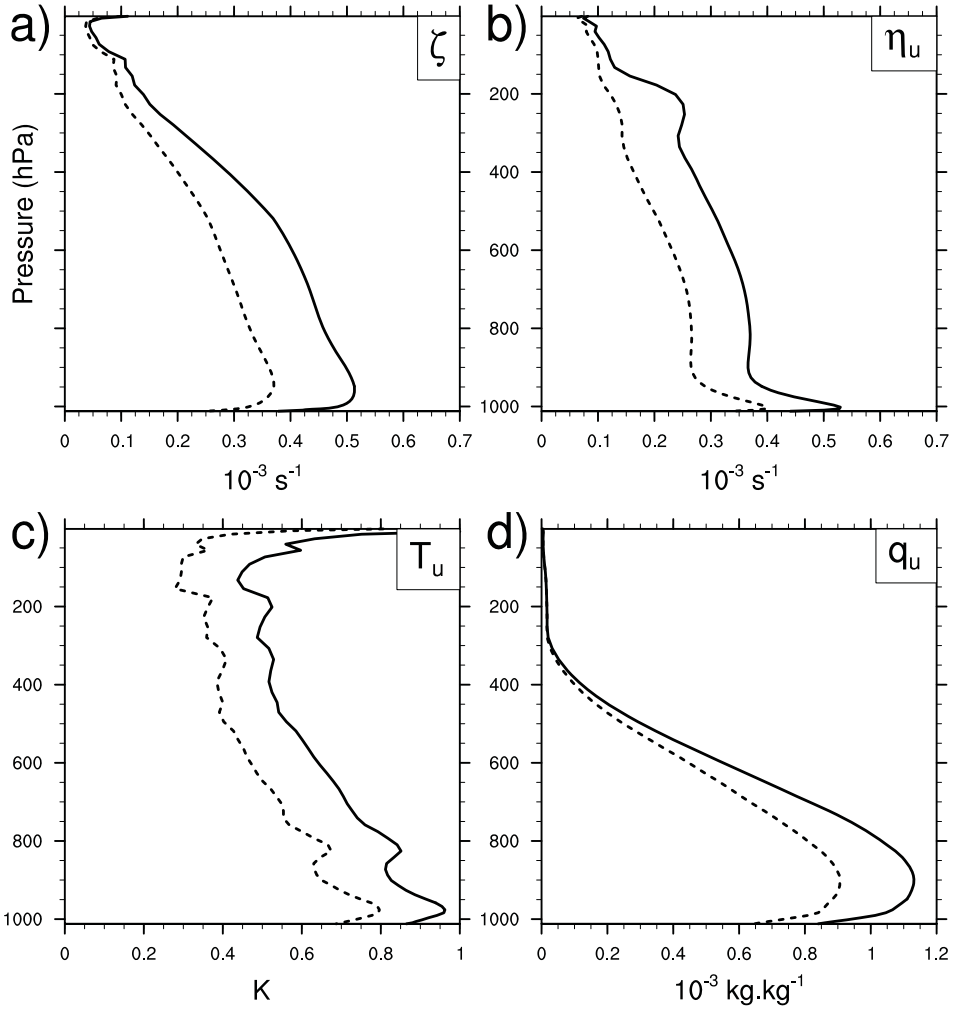


Figure 6.13. – Racine quatrième de la variance horizontale des variances brutes (trait plein) et des variances filtrées (tireté), pour la vorticité (a), la divergence non balancée (b), la température non balancée (c) et l'humidité spécifique non balancée (d).

Comportement de la troncature de filtrage

On choisit de filtrer les variances avec un noyau gaussien dont la longueur est optimisée par le critère général 4.7. Les principales caractéristiques pour la période de la troncature spectrale correspondant à cette longueur de filtrage sont données par la figure 6.14. La variabilité importante de cette troncature de filtrage semble indiquer une forte dépendance à l'écoulement du filtre développé dans la section 4.1. Contrairement à ce qui observé dans la figure 13 de Bonavita *et al.* (2011), la troncature spectrale ne montre pas d'effet de saturation, ce qui signifie que le filtrage est toujours actif, quelque soit la variable et le niveau, à l'exception de q_u dans la stratosphère.

On note les points déjà mentionnés au chapitre précédent : nécessité d'un filtrage plus fin pour ζ et η_u avec des troncatures moyennes autour de 20, filtrage de grande échelle pour T_u au-dessus de la tropopause dû à la plus grande uniformité de cette variable à ces altitudes, très forte troncature utilisée pour q_u dans ces mêmes couches très sèches de l'atmosphère qui implique en fait un filtrage quasiment nul. À l'échelle globale dans l'AEARP opérationnelle (Raynaud *et al.*, 2011), ces deux derniers points sont également visibles, bien que les profils moyens soient plus bruités. Pour ζ et η_u en revanche, des valeurs de troncature équivalentes à celles des autres variables ont été trouvées, ce qui est probablement dû à la faible résolution spatiale utilisée.

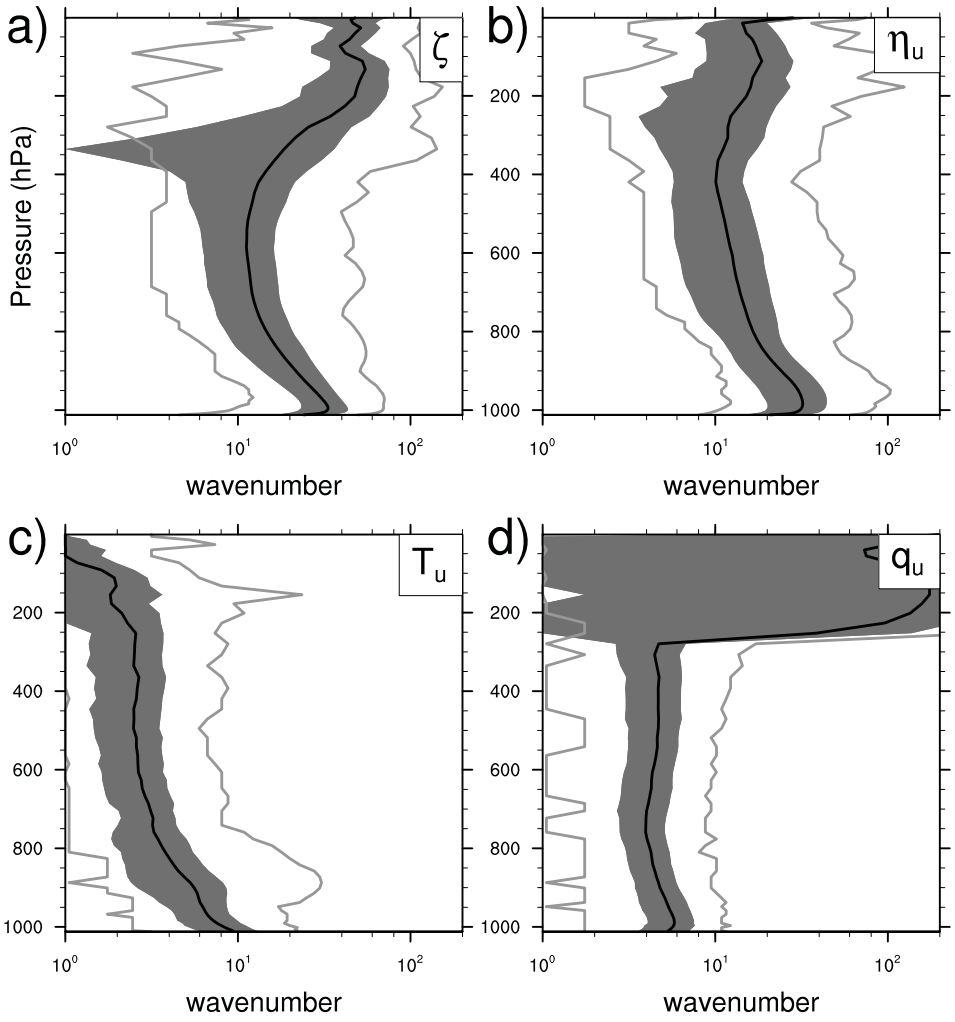


Figure 6.14. – Troncature de filtrage : moyenne temporelle (trait plein noir), écarts-types (zone grisée) et extrema (traits pleins gris), pour la vorticité (a), la divergence non balancée (b), la température non balancée (c) et l'humidité spécifique non balancée (d).

Dépendance au flux de la troncature de filtrage

Il est parfois possible de corréler la troncature de filtrage à certains prédicteurs pertinents. Ainsi, la figure 6.15 montre la série temporelle de troncature de filtrage des variances de divergence non balancée de basse couche, moyennée verticalement de la surface au niveau 53 ($\sim$ 980 hPa, noir), et lissée sur une fenêtre de 24 h pour enlever le signal diurne. On la superpose aux séries temporelles de deux prédicteurs caractéristiques du régime de temps dominant :

— la pression de surface moyenne sur le domaine,
— la proportion de zones précipitantes dans le domaine.

On constate alors que les variations de troncature de filtrage semblent être corrélées avec celles de pression de surface moyenne, et anticorrélées avec la proportion de zones précipitantes, qui sont logiquement étendues en période dépressionnaire. C'est ce qu'indique la figure 6.16, en quantifiant ces corrélations : 0,56 pour la pression de surface moyenne et -0,53 avec la proportion de zones précipitantes. Ces corrélations non nulles confirment que la troncature de filtrage obtenue par le critère général 4.7 dépend de l'écoulement. Cependant, la complexité de cette dépendance peut se manifester à travers tous les facteurs listés dans l'illustration analytique de la section 4.3 qui influencent la longueur de filtrage : écart-type et échelle caractéristique des variances asymptotiques, nombre de membres de l'ensemble.

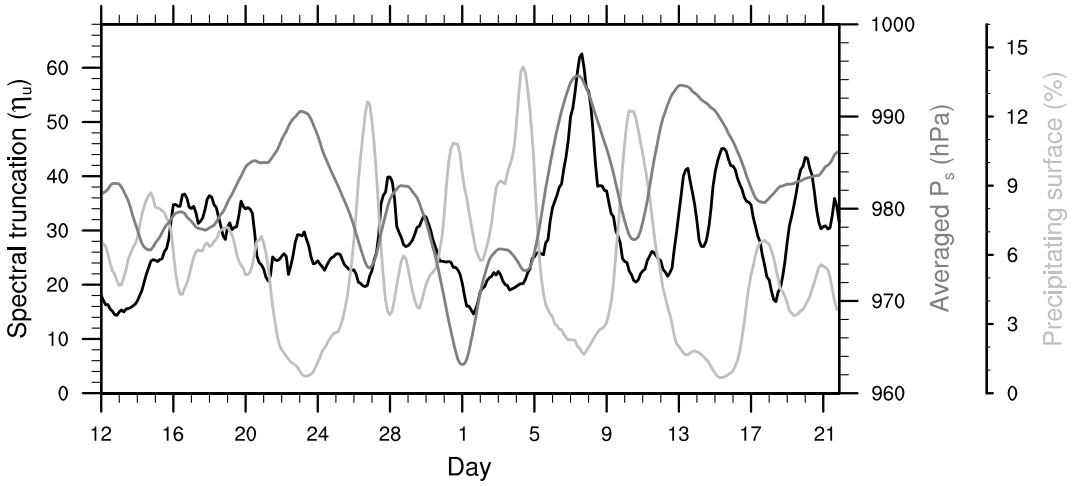


Figure 6.15. – Séries temporelles de troncature spectrale du filtrage des variances de divergence non balancée, moyennée verticalement de la surface au niveau 53 ($\sim$ 980 hPa, noir), de pression de surface moyenne sur le domaine (gris) et de proportion de zones précipitantes dans le domaine (gris clair). Une moyenne glissante de 24 h a été appliquée pour lisser la variabilité diurne.

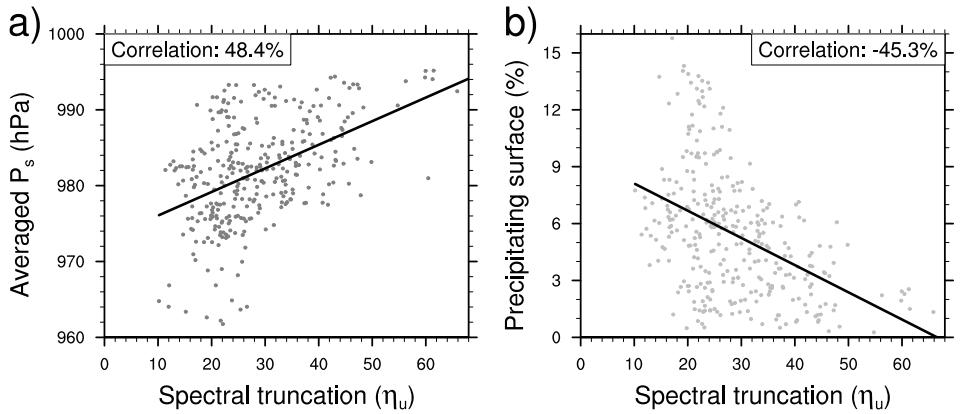


Figure 6.16. – Corrélations entre la troncature spectrale du filtrage des variances, moyennée verticalement de la surface au niveau 53 ($\sim$ 980 hPa) d'une part et la pression de surface moyenne sur le domaine (a) ou le pourcentage de zone précipitante dans le domaine (b) d'autre part.

6.2.3. Utilisation des variances filtrées

Configurations testées

Pour évaluer la pertinence de l'utilisation des variances du jour et l'impact de leur filtrage dans les matrices d'autocovariance des variables non balancées d'AROME, on teste plusieurs configurations pour les variances échantillonnées à partir de l'ensemble de 6 membres, résumées dans le tableau 6.2 :

Table 6.2. – Configurations de variances testées avec l'ensemble à longue période.

Configuration	Moyenne temporelle	Filtrage spatial
"Climatological var."	Oui	Moyenne horizontale
"Averaged var."	Non	Moyenne horizontale
"Raw var."	Non	Non
"Filtered var."	Non	Filtrage horizontal
"Averaged/filtered var."	Non	Moyenne horizontale pour (ζ, η_u), Filtrage horizontal pour (T_u, q_u)
"Filtered var.-CoSu"	Non	Filtrage horizontal Opérateur $\mathcal{H}$ à support compact (Guidard, 2007)
"Averaged var.-univariate"	Non	Moyenne horizontale Opérateur $\overline{\mathbf{K}}_p = \mathbf{I}$
"Filtered var.-univariate"	Non	Filtrage horizontal Opérateur $\overline{\mathbf{K}}_p = \mathbf{I}$

La figure 6.17 montre les cartes de variances brutes et filtrées en basse couche pour ζ, T_u et q_u. On peut remarquer les différences d'échelle caractéristique pour les variances brutes entre ζ d'un côté et T_u/q_u de l'autre, ainsi que l'efficacité du filtrage pour réduire le bruit d'échantillonnage. Il faut noter que les variances ont été recalculées spécialement dans les deux dernières configurations : soit en utilisant $\mathcal{H}$ à support compact pour appliquer $\overline{\mathbf{K}}_p^{-1}$ dans "Filtered var.-CoSu", soit sans appliquer $\overline{\mathbf{K}}_p^{-1}$ pour obtenir les variances totales dans "Filtered var.-univariate".

Premier incrément d'analyse

Comme pour l'ensemble décrit au chapitre 2, plusieurs cycles d'assimilation de l'ensemble sont effectués avant d'obtenir un ensemble mature utilisable (typiquement 4 cycles, cf. figure 2.9). Dès que cette période est terminée, les différentes configurations sont lancées à partir d'une ébauche commune (celle de l'opérationnel). Lors du premier cycle d'assimilation pour ces configurations, les ébauches sont donc toutes semblables, mais les variances utilisées dans la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ sont différentes. Les incréments d'analyse obtenus à l'issue des minimisations pour les différentes configurations donnent donc une indication intéressante sur l'impact des variances spécifiées dans un cadre où l'ensemble des observations est pris en compte (cf. chapitre 2).

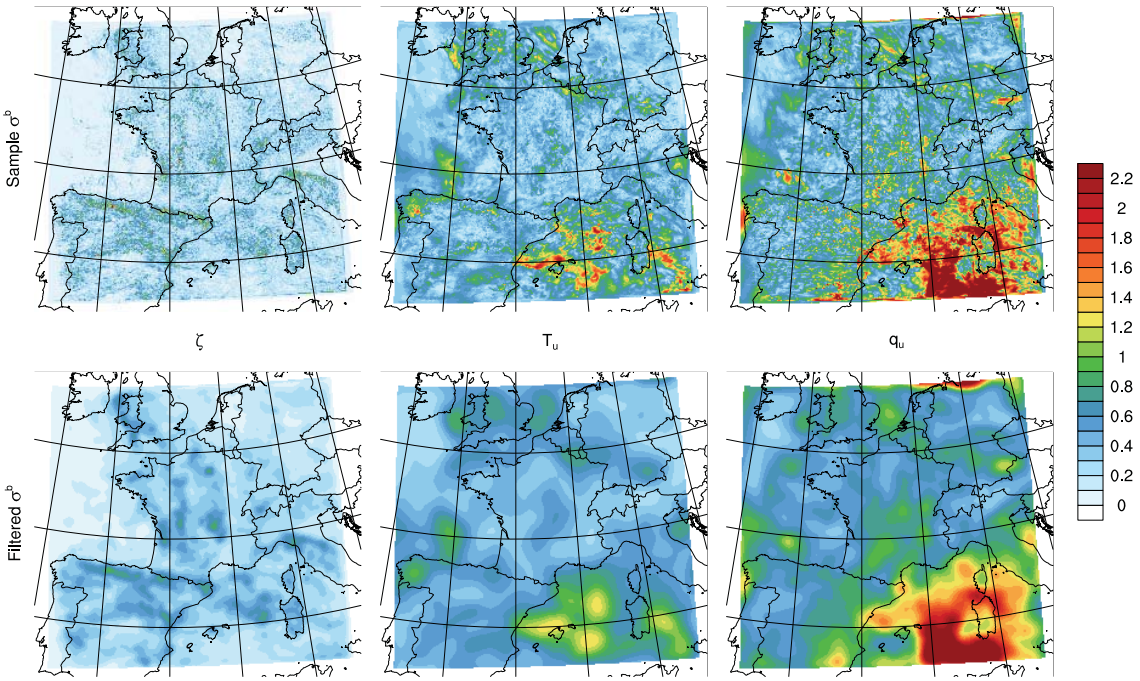


Figure 6.17. – Ecarts-types d'erreur d'ébauche de vorticité, de température non balancée et d'humidité spécifique non balancée au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa, de gauche à droite), bruts (en haut) et filtrés (critère général 4.7, en bas), pour l'ensemble à 6 membres, le 11 octobre 2012, 15 h UTC (unités respectives : 10^{-3} s^{-1}, K et $g.kg^{-1}$).

Les figures 6.18 et 6.19 montrent respectivement des coupes d'incrément d'analyse de température, horizontale en basse couche et verticale. Ainsi, comme on l'a noté dans la première section de ce chapitre, les variances brutes augmentent l'amplitude et la portée des covariances modélisées, et donc de l'incrément d'analyse, en particulier dans les zones peu observées (ex. : proche Atlantique, sud de la Sardaigne). Dans les zones densément observées, le bruit d'échantillonnage reste visible, mais les synergies entre observations limitent l'amplitude et la portée des incréments. Le filtrage des variances permet de ramener efficacement l'incrément à des structures plus vraisemblables. L'impact de la réduction de $\mathcal{H}$ à un support compact est faible, mais visible pour les structures de grande portée, en particulier dans les zones peu observées. Dans ce cas, l'analyse obtenue est très proche de la configuration "Averaged/filtered var.", où seules des valeurs moyennes de variance sont prises en compte pour les variables dynamiques. L'utilisation de variances hétérogènes filtrées pour ces dernières ("Filtered var.") a pour effet d'augmenter globalement les amplitudes des incréments, comme on peut le voir surtout sur les coupes verticales (figure 6.19). Ceci confirme les conclusions de la section précédente, où l'augmentation de l'amplitude due aux termes multivariés dans les covariances totales était déjà visible pour ce cas de figure. L'absence d'opérateur de balance diminue l'amplitude de l'incrément du fait de la suppression des contributions multivariées.

Les incréments de vent zonal (figures 6.20 et 6.21) sont plus importants dans le cas "Filtered var" que dans le cas "Averaged var", ce qui était déjà le cas pour la température (figures 6.18 et 6.19). Ces modifications importantes sont dues aux écarts types de ζ et de η_u (comme le confirme la comparaison entre "Filtered var" et "Averaged/Filtered var"). Elles sont également présentes dans le cas univarié (sous-figure "Filtered var.-univariate"). L'hétérogénéité des variances de ζ et de η_u a donc un effet marqué sur les incréments de vent (de façon indépendante des aspects de balance) qui n'est peut être pas pertinent.

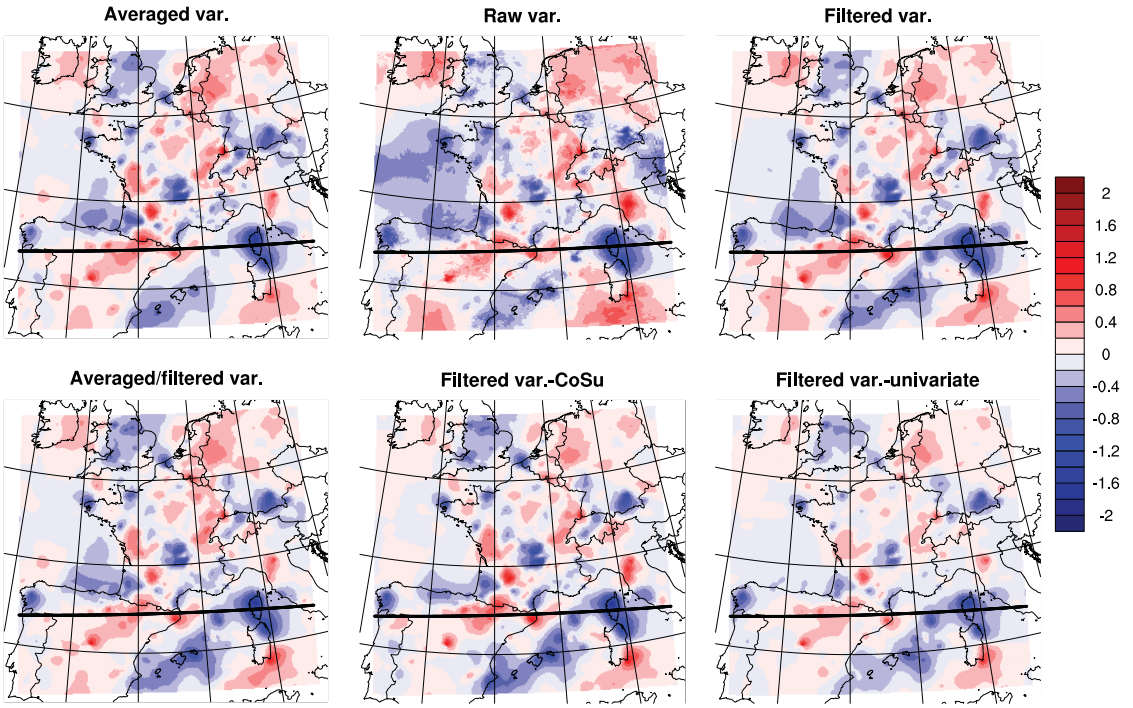


Figure 6.18. – Incrément d'analyse de température au niveau 50 ($\sim$ 945 hPa) lors du premier cycle d'assimilation de certaines configurations du tableau 6.2, le 11 octobre 2012, 15 h UTC (unité : K).

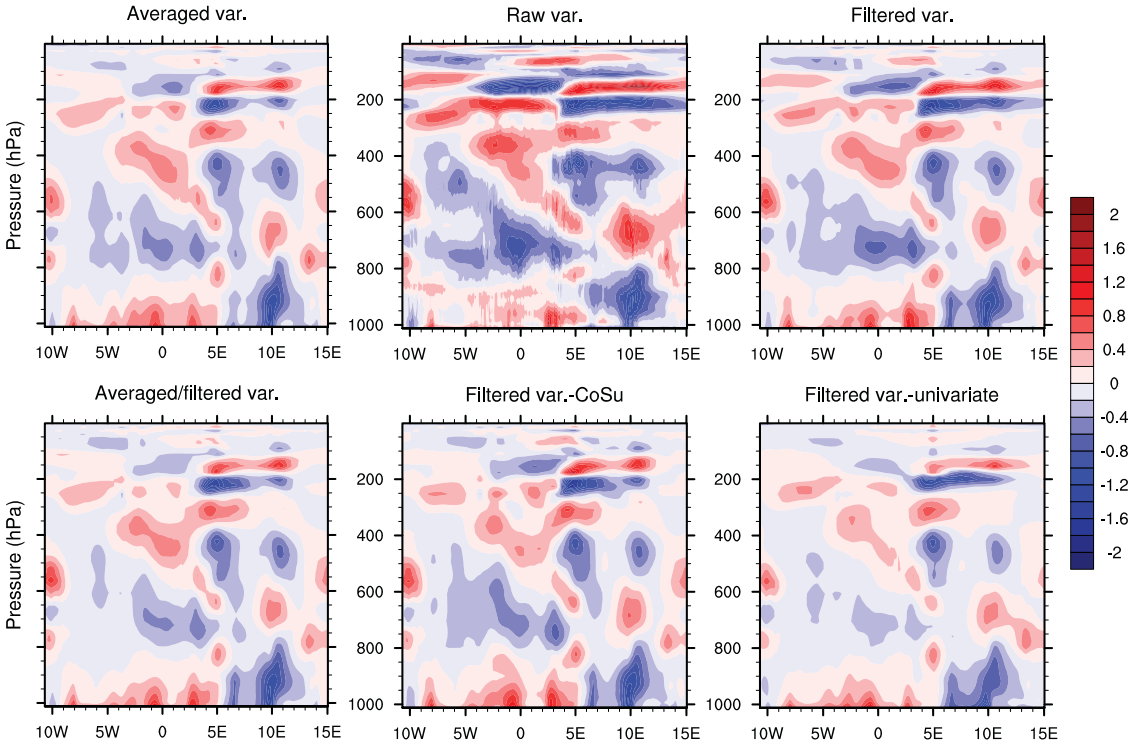


Figure 6.19. – Incrément d'analyse de température aux alentours de la latitude 42°N (ligne noire sur la figure 6.18), lors du premier cycle d'assimilation de certaines configurations du tableau 6.2, le 11 octobre 2012, 15 h UTC (unité : K).

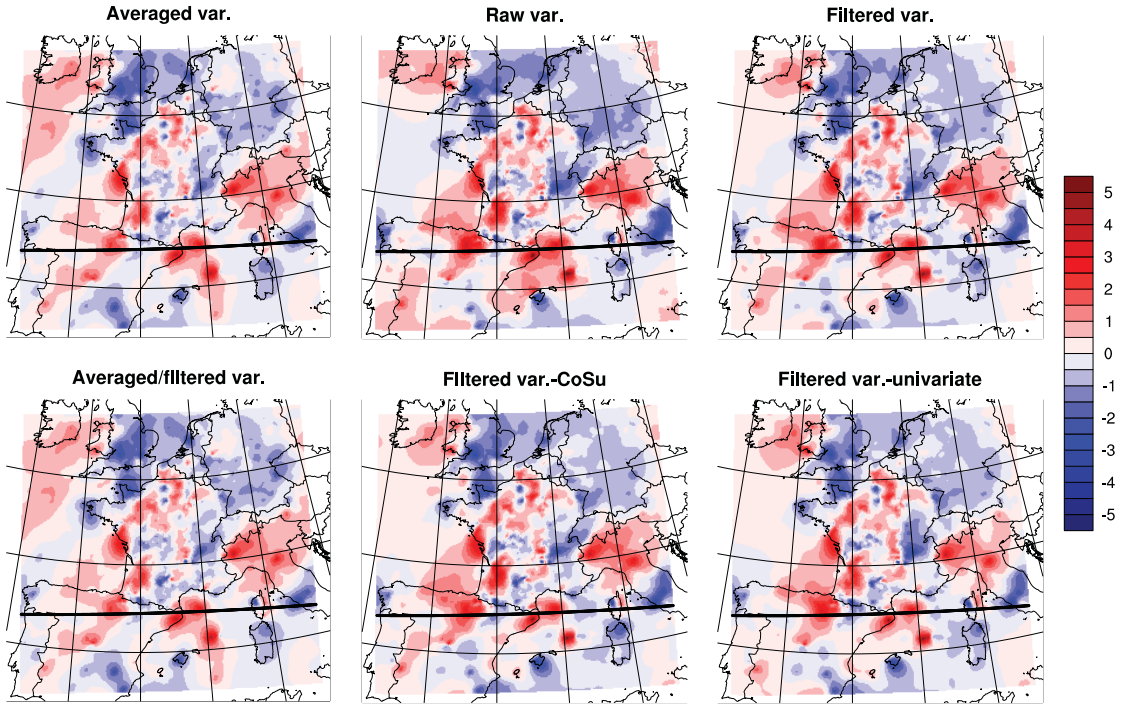


Figure 6.20. – Comme la figure 6.18 pour le vent zonal (unité : m.s^{-1}).

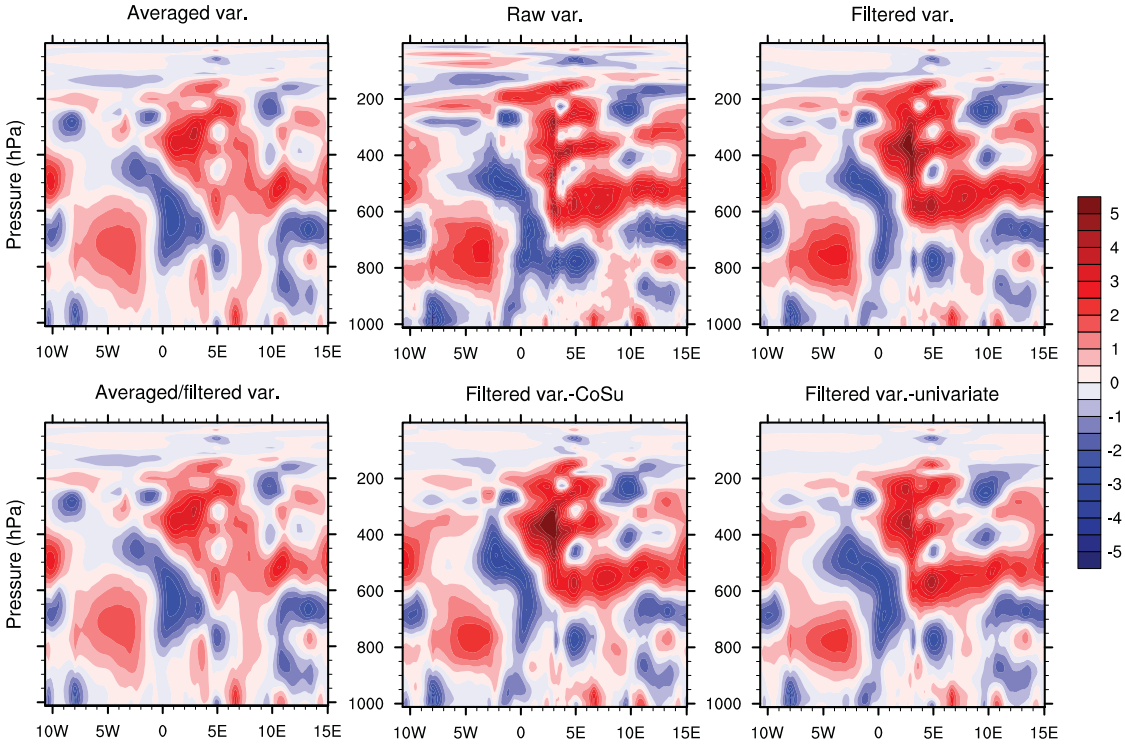


Figure 6.21. – Comme la figure 6.19 pour le vent zonal (unité : m.s^{-1}).

Il faut noter que dans chaque configuration, la variance moyenne donnée par Tr $(\overline{\mathbf{B}})$ est différente, ce qui modifie *de facto* l'amplitude de l'incrément d'analyse. Cependant, aucun ajustement n'a été entrepris pour que cette valeur moyenne se rapproche de sa valeur optimale, ce qui est généralement fait pendant le réglage d'un système d'assimilation.

Spin-up du modèle

Comme mentionné au chapitre 1, il est important que l'incrément d'analyse respecte les grands équilibres du modèle (hydrostatisme et géostrophisme en particulier), afin d'éviter un ajustement brutal de l'état du modèle vers l'attracteur dans les premiers pas de temps de la prévision. Cependant, cet ajustement (appelé spin-up) a toujours lieu, et peut être quantifié en examinant la moyenne spatiale de certaines tendances physiques, de pression de surface notamment (figure 3 de Seity *et al.* (2011)). Il faut noter que ce diagnostic, montré par la figure 6.22 pour les différentes configurations, quantifie le caractère équilibré ou non de l'incrément d'analyse, pas sa pertinence complète. Par exemple, un incrément nul est parfaitement équilibré, et donne un spin-up minimum. A titre de référence, le spin-up diagnostiqué par Seity *et al.* (2011) pour les premières configurations du 3D-Var AROME est de l'ordre de 12 Pa.s^{-1}, ce qui signifie que même notre configuration ayant le plus fort spin-up reste à des valeurs acceptables.

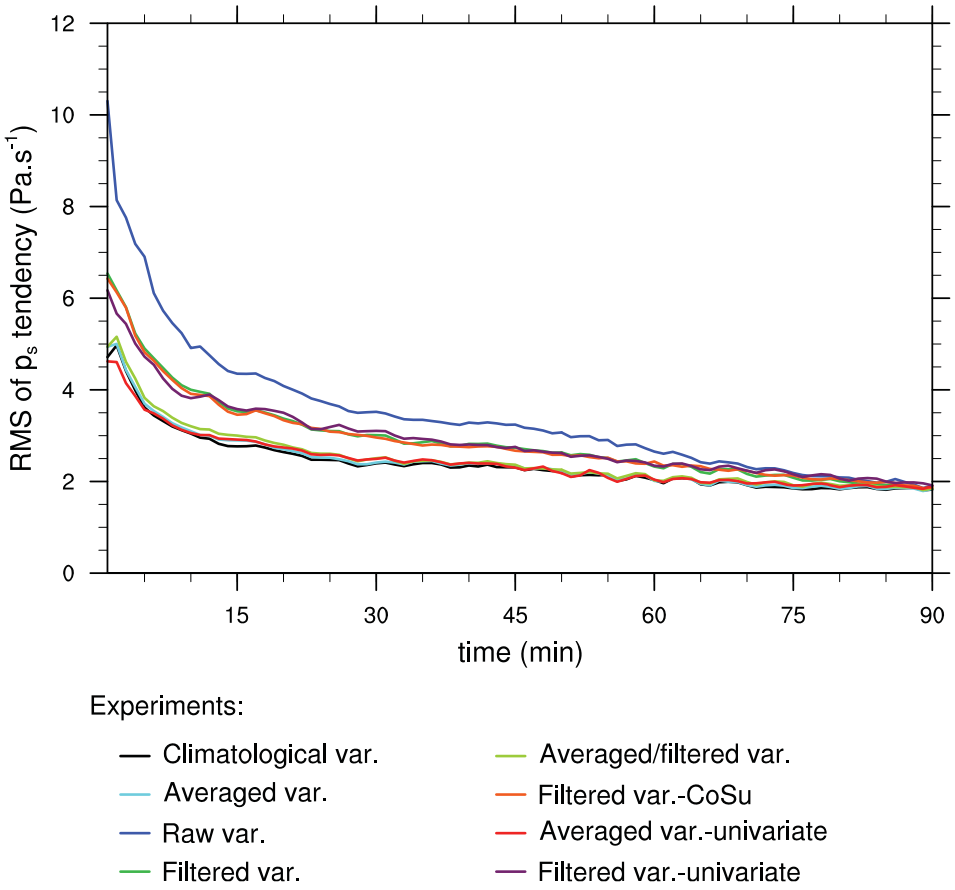


Figure 6.22. – Evolution temporelle de la racine carrée de la moyenne quadratique de la tendance de pression de surface lors du premier cycle d'assimilation des différentes configurations du tableau 6.2, le 11 octobre 2012, 15 h UTC (unité : Pa.s^{-1}).

La texture des variances de (ζ, η_u) semble être le paramètre qui détermine l'intensité du spin-up, et ce indépendamment des options de balance utilisées :

— variances brutes, le spin-up est important ($\sim 10,5$ Pa.s^{-1}),
— variances filtrées spatialement (avec ou sans support compact de $\mathcal{H}$), le spin-up est plus faible ($\sim 6,5$ Pa.s^{-1}),
— variances moyennées spatialement (climatologiques ou non), le spin-up est encore réduit (~ 5 Pa.s^{-1}).

Cette dépendance assez prononcée du spin-up à l'hétérogénité de ζ et η_u suggère que le celui-ci est induit par l'amplitude et la forme des incréments de vent, qui sont elles-mêmes contrôlées en grande partie par les innovations de vent d'une part, et par les variances de ζ et η_u d'autre part. Cette interprétation semble soutenue par le fait que le niveau de spin-up est bien lié à l'hétérogénéité des variances de ζ et η_u, de façon indépendante des options de balances utilisées.

Il peut en outre paraître contre-intuitif de constater que le spin-up soit toujours du même ordre, que la balance soit active ou non (matrice $\overline{\mathbf{B}}$ multivariée ou univariée). En l'absence de balance, on s'attendrait en effet à ce que les champs de vent et de masse soient moins bien équilibrés, augmentant le spin-up. Ceci suggère donc que les opérateurs de balance utilisés sont potentiellement peu efficaces pour améliorer l'équilibre de l'incrément, d'autant que le domaine AROME étant densément observé, l'incrément pourrait être bien équilibré même en l'absence d'opérateur de balance, ce qui a été illustré dans Fisher *et al.* (2009) pour un modèle global.

Scores

De façon générale, on évalue les analyses et prévisions réalisées par les différentes configurations face à une référence (observations ou analyse indépendante). Deux types de quantités sont calculés : des biais et des scores dont la valeur est toujours positive pour les cas qui nous intéressent. Pour pouvoir comparer efficacement les différentes configurations, on choisit une configuration de référence, ici celle se basant sur les variances climatologiques ("Climatological var.").

On compare alors les valeurs absolues des biais de chaque configuration à la valeur absolue du biais de la configuration de référence :

$$\Delta|\text{Biais}| = |\text{Biais}| - |\text{Biais}_{\text{ref}}| \tag{6.12}$$

Pour les autres scores, on effectue la comparaison en normalisant par le score de la configuration de référence :

$$\Delta \log \text{Score} = \frac{\text{Score} - \text{Score}_{\text{ref}}}{\text{Score}_{\text{ref}}} \tag{6.13}$$

Les scores utilisés sont la RMSE, le Heidke skill score (HSS) et le Brier skill score (BSS), ces deux derniers étant décrits dans Amodei et Stein (2009).

Les biais et les scores, moyennés sur les 6 semaines de l'expérience, sont rassemblés dans les pages suivantes pour les prévisions issues du réseau de 0 h UTC. Des scores similaires ont été calculés pour des prévisions issues du réseau de 12 h UTC (non montrés), donnant des résultats cohérents. Les zones bleues y correspondent à une amélioration par rapport à la configuration de référence, et les zones rouges à une dégradation.

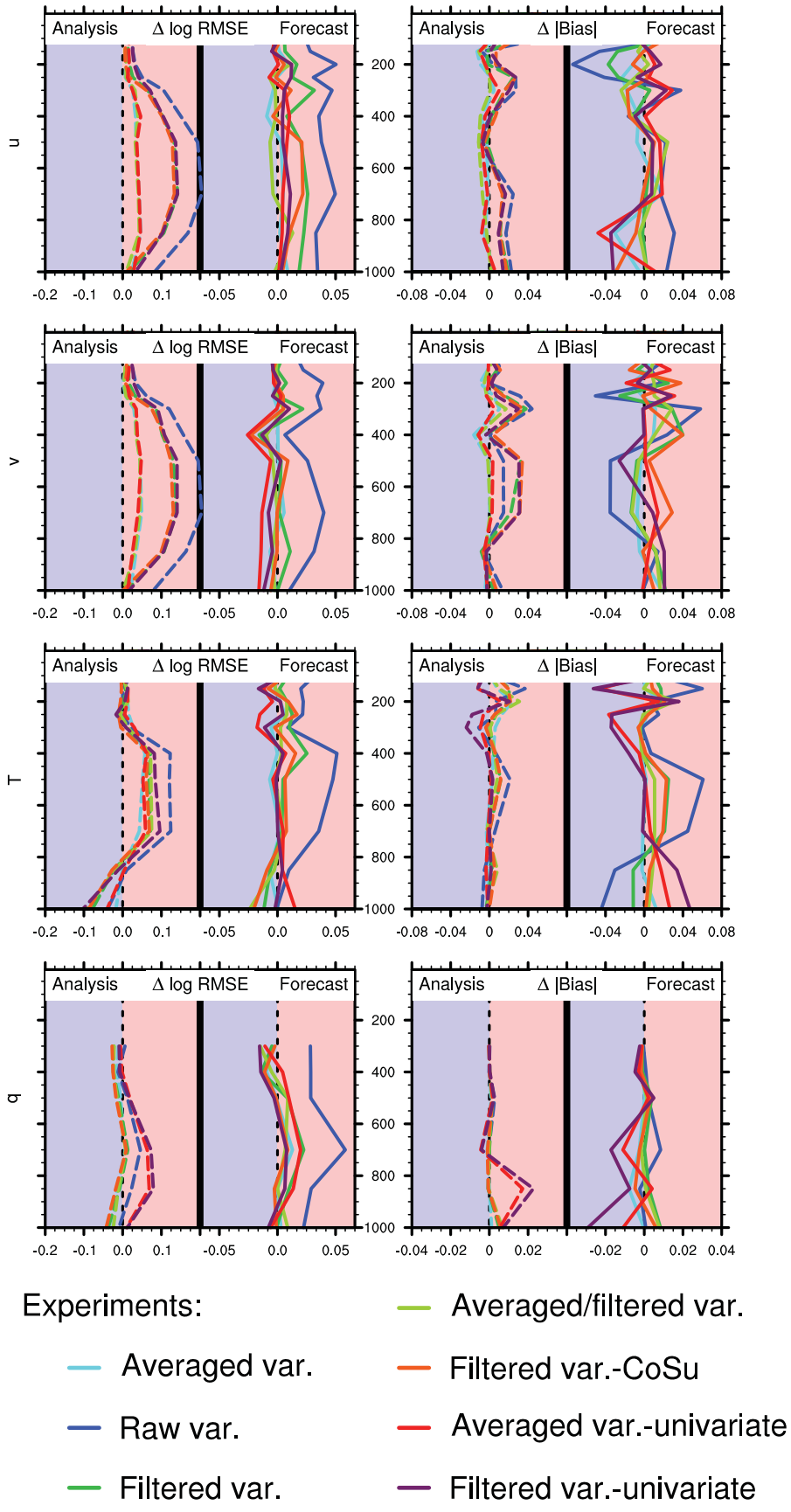


Figure 6.23. – Variations relatives de RMSE et variations de biais pour les analyses et les prévisions à 3 h d'échéance comparées aux radiosondages de vent zonal (u), de vent méridien (v), de température (T) et d'humidité spécifique (q, en g.kg^{-1}).

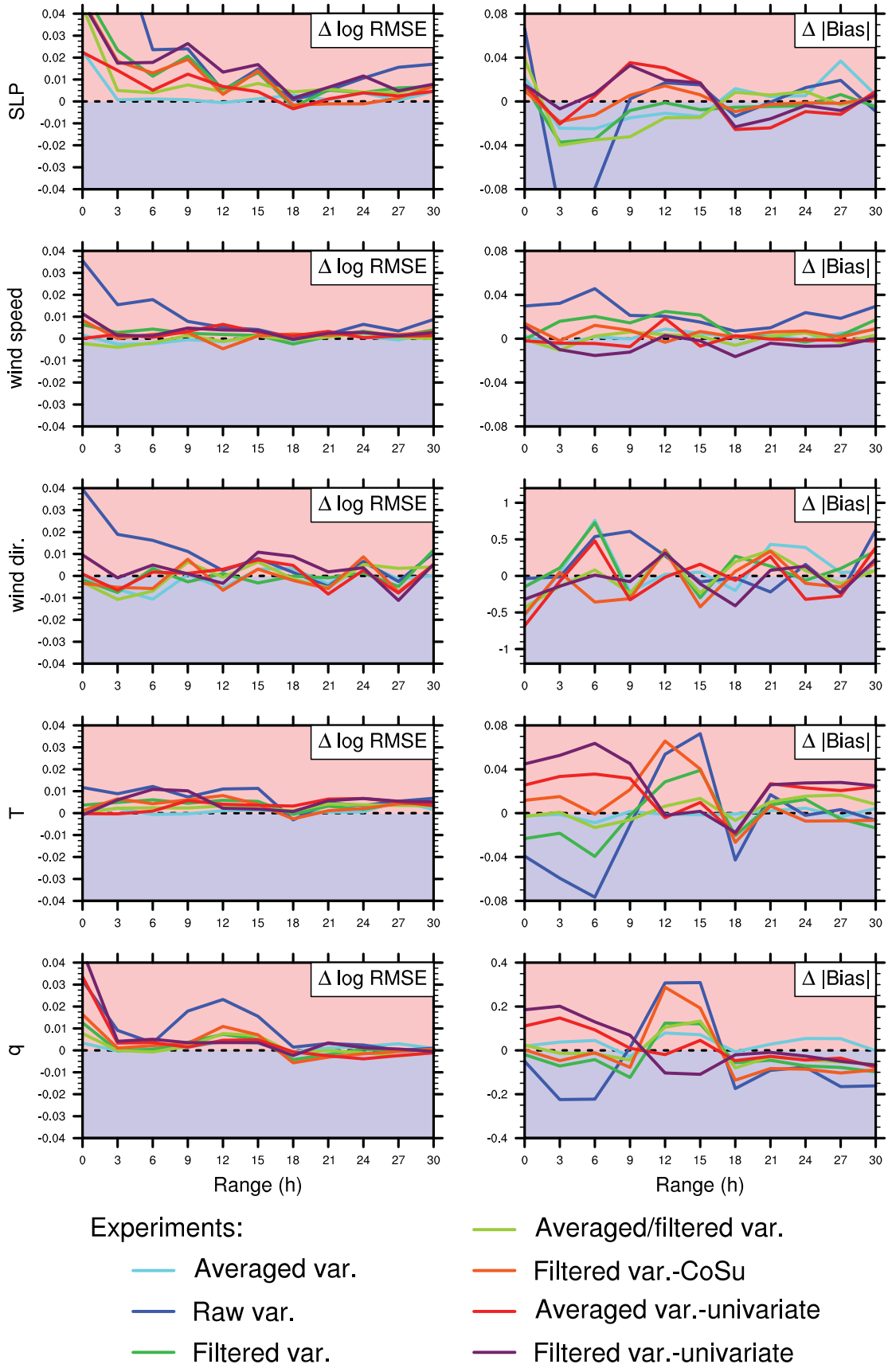


Figure 6.24. – Variations relatives de RMSE et variations de biais pour les analyses et les prévisions jusqu'à 30 h d'échéance issue de l'analyse de 0 h UTC, comparées aux observations de surface de pression ramenée au niveau de la mer (SLP), de force du vent, de direction du vent, de température (T) et d'humidité spécifique (q, en g.kg^{-1}).

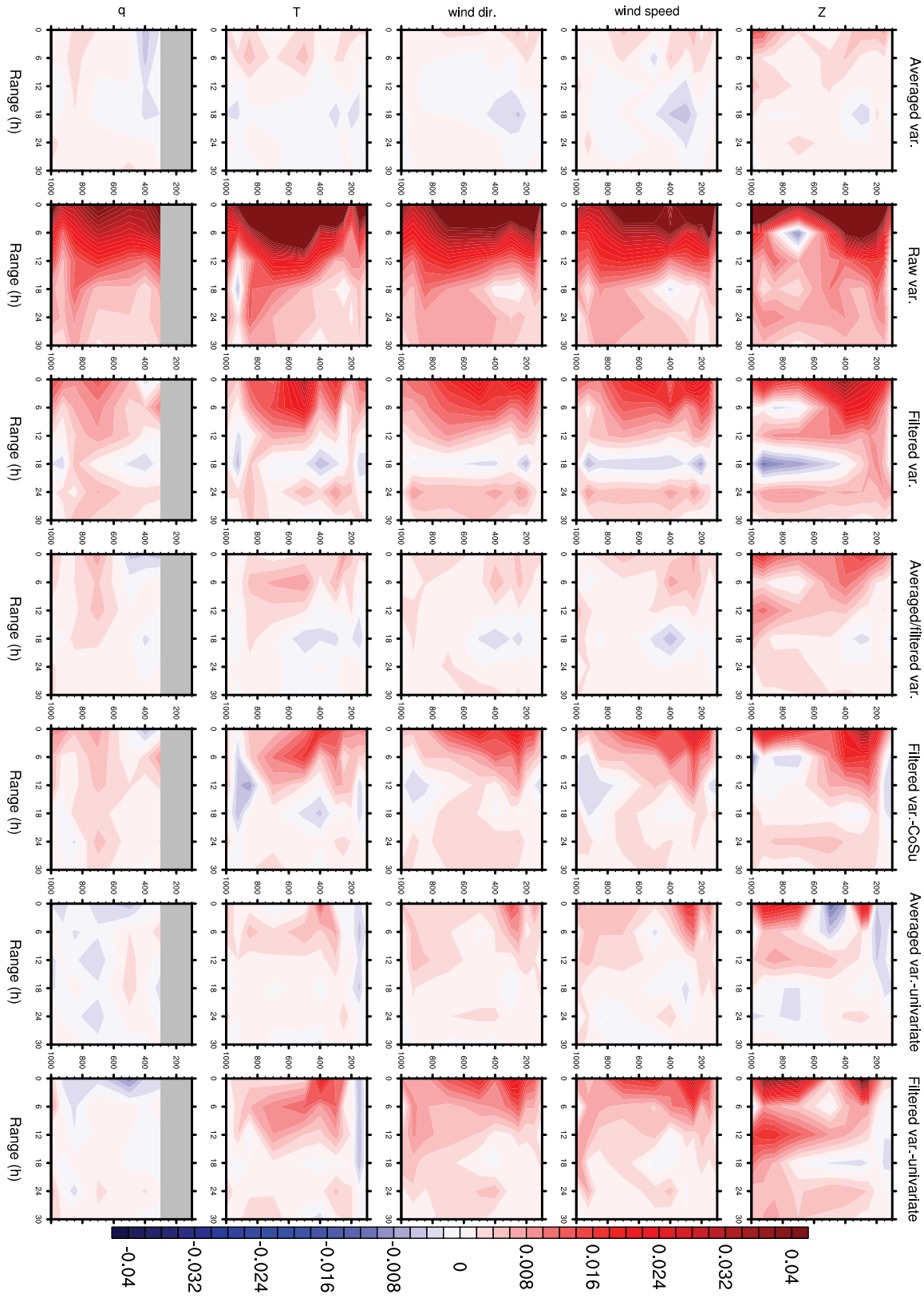


Figure 6.25. – Variations relatives de RMSE pour les analyses et les prévisions jusqu'à 30 h d'échéance issue de l'analyse de 0 h UTC, comparées aux analyses du CEPMMT de géopotentiel (Z), de force du vent, de direction du vent, de température (T) et d'humidité spécifique (q).

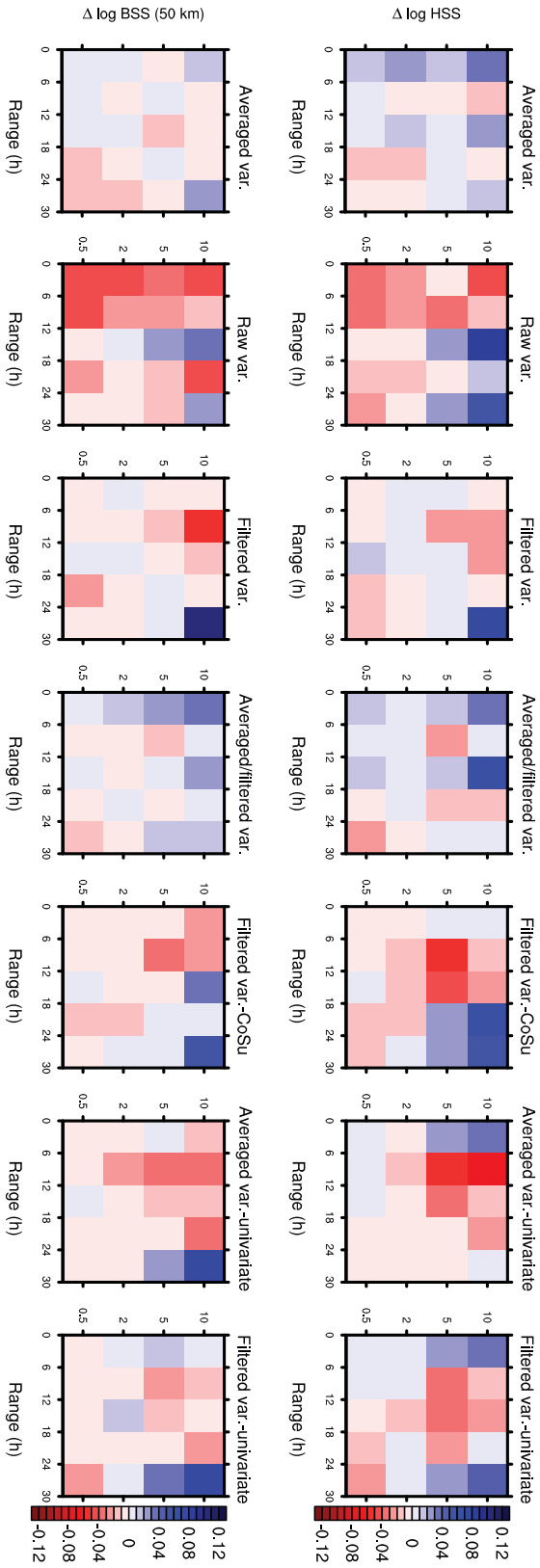


Figure 6.26. – Variations relatives de Heidke skill score (HSS) et de Brier skill score sur un voisinage de 50 km (BSS) pour les cumuls de précipitation sur 6 h, pour les analyses et les prévisions jusqu'à 30 h d'échéance issue de l'analyse de 0 h UTC, comparées aux observations.

Globalement, on constate que l'apport des variances du jour et de leurs variations spatiales est neutre à négatif pour les prévisions du modèle AROME. Les scores sont généralement dégradés pour l'analyse et les premières échéances, puis retournent à un état neutre à plus longue échéance. Les rares améliorations constatées sont passagères, peu significatives, et parfois difficiles à recouper entre les différents scores.

Cependant, plusieurs tendances semblent se dégager, qui ne sont valables que dans le cadre expérimental présenté :

1. La comparaison des analyses aux données de radiosondages pour le vent (figure 6.23) fait ressortir les trois groupes de configurations déjà présents dans la figure 6.22 pour le spin-up. Ceci indique que plus la texture des variances de ζ et η_u est de petite échelle, plus l'incrément est de grande amplitude (figures 6.18 à 6.21), mais qu'il ne se rapproche pas davantage des observations, bien au contraire. Cet aspect n'est plus visible pour les prévisions dès 3 h d'échéance, mais il va dans le sens des remarques sur les incréments de vent et sur l'étude du spin-up.
2. Les configurations "Climatological var." et "Averaged var." donnent des scores proches. La seconde montre toutefois de légères améliorations pour le vent par rapport aux observations de surface (figure 6.24), ainsi que l'après-midi par rapport aux analyses du CEPMMT (figure 6.25) pour le réseau de 0 h UTC. Les scores aux précipitations sont eux aussi améliorés jusqu'à 18 h d'échéance.
3. La configuration "Averaged/filtered var." a de meilleurs scores que "Filtered var.". Les fortes dégradations de cette dernière configuration par rapport aux analyses du CEPMMT avant 12 h d'échéance en particulier sont fortement estompées. Ceci confirme l'impact négatif des variances hétérogènes pour le couple (ζ, η_u), esquissé par les modifications importantes des covariances multivariées qui en résultent (première section de ce chapitre), des incréments de vent (figure 6.21) et par une augmentation du spin-up (figure 6.22). Cependant, cette configuration a aussi des scores légèrement moins bons que "Averaged var.". Cela semble indiquer que les variances hétérogènes de T_u et q_u n'ont pas non plus d'impact positif par rapport à des variances homogènes, même si la dégradation est moins marquée qu'avec les variances hétérogènes de ζ et η_u.
4. Cet impact négatif des variances hétérogènes pour le couple (ζ, η_u) est également confirmé par la nette dégradation de la configuration "Filtered var.-univariate" par rapport à "Averaged var.-univariate", qui est globalement plus marquée en vent qu'en température. Cette comparaison confirme également le fait que l'hétérogénéité du couple (ζ, η_u) semble poser problème pour le vent horizontal, indépendamment des options de balance utilisées.
5. La configuration "Filtered var.-CoSu" n'est pas significativement meilleure que la configuration "Filtered var." (meilleure pour les scores de RR6 l'après-midi, mais moins bonne pour les autres). Comme on a pu le constater sur la figure 6.3, l'effet du support compact de l'opérateur $\mathcal{H}$ est bien visible, puisqu'il permet de limiter la portée parfois trop longue des covariances, mais pas leur amplitude excessive quand les variances spécifiées sont trop hétérogènes.
6. La configuration "Raw var." donne comme prévu les moins bons scores, et son spin-up est très fort. Cela confirme le risque d'utiliser des variances brutes pour les variables non balancées dans la modélisation de la matrice $\overline{\mathbf{B}}$, le filtrage étant nécessaire pour de petits ensembles.
7. Les configurations "Averaged var.-univariate" et "Filtered var.-univariate" donnent des résultats contrastés, mais on peut noter qu'ils sont du même ordre que ceux des configurations "Averaged var." et "Filtered var.", respectivement. D'une part, cela signifie

que les interactions entre balances spectrales et variances dans l'espace physique ne sont pas les seules responsables de la dégradation des scores lorsque les variances deviennent hétérogènes. D'autre part, cela semble indiquer que les scores de prévision sont faiblement sensibles à l'action des opérateurs de balance, comme l'avaient observé Fisher *et al.* (2009) pour un modèle global dans des zones densément observées. Enfin, on note une bonne tenue des scores d'humidité jusqu'à 12 h d'échéance par rapport aux analyses du CEPMMT. À l'échelle convective et pour la période considérée, l'utilisation de balances statiques pour l'humidité spécifique semble sous-optimale, principalement car l'intensité des couplages de l'humidité avec les autres paramètres dépend grandement de la présence ou non de nuages et de précipitations. Montmerle et Berre (2010) ont par exemple montré de fortes variations dans le couplage entre divergence et humidité spécifique selon que la zone est précipitante ou non. De même, on trouve dans la figure 6 de Ménétrier et Montmerle (2011) de grandes disparités dans le couplage entre température et humidité spécifique selon que la zone est couverte de brouillard ou non. Le signe des couplages entre température et humidité spécifique change selon que l'humidité relative de l'atmosphère est plutôt élevée ou faible, comme le montrent Andersson *et al.* (2005) et Hólm *et al.* (2002).

6.3. Conclusions

Ce chapitre évalue l'introduction de variances hétérogènes issues d'un ensemble dans le modèle de covariances d'erreur d'ébauche utilisé dans le 3D-Var AROME. Ces variances sont filtrées spatialement pour limiter le bruit d'échantillonnage suivant l'algorithme développé et validé dans les chapitres précédents. Elles sont ensuite insérées dans la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ spectrale d'AROME, les autres opérateurs décrivant les corrélations spatiales et la balance restant inchangés.

Le diagnostic de la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ ainsi modélisée a montré que l'inclusion de variances hétérogènes pouvait altérer significativement la portée des covariances, et augmenter fortement le poids donné à sa composante multivariée. Le filtrage objectif des variances permet de réduire ces artefacts. Toutefois, rien ne permet de s'assurer que ce filtrage, optimal au sens de la section 3.2 (minimisation de l'espérance de la norme euclidienne au carré par rapport au signal "vrai") soit également optimal au sens où il permettrait une modélisation plus pertinente des covariances totales de $\overline{\mathbf{B}}$. Ainsi, même en utilisant les variances filtrées, la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ totale n'est que faiblement dépendante de l'écoulement, et diffère nettement des covariances échantillonnées directement à partir du grand ensemble.

Il est sans doute possible d'améliorer la modélisation de la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ hétérogène. Les portées excessives peuvent être en partie corrigées par l'application de l'opérateur $\mathcal{H}$ à support compact, au prix de l'ajout de paramètres arbitraires (la longueur du support compact). Une autre piste pourrait être d'améliorer la formulation de la balance. En effet, une partie du signal semble provenir de la projection de la variabilité spatiale des variances dans l'espace spectral, notamment au niveau des balances. Un autre couple de variables dynamiques pourrait être recherché pour représenter le vent horizontal. Au vu des effets des variances de ζ et η_u (de façon quasi-indépendante des options de balance utilisées) sur les incréments de vent, sur le spin-up et sur les scores, un autre couple de variables dynamiques pourrait être recherché pour représenter les erreurs sur le vent horizontal. Ainsi, plusieurs centres de prévision numérique utilisent la fonction de courant et le potentiel de vitesse dans leur variable de contrôle (Met Office : Lorenc *et al.* (2000)). Pour ce qui est des balances, une formulation basée sur des régressions dans l'espace physique pourrait être considérée (WRF : Barker *et al.* (2004), NCEP :

Wu *et al.* (2002)), avec l'avantage de pouvoir introduire des variations géographiques mais au détriment cependant de la dépendance des couplages multivariés aux différentes échelles spatiales en jeu.

L'inclusion de cette matrice $\overline{\mathbf{B}}$ dans le 3D-Var AROME donne des résultats décevants. Une première étude (Brousseau *et al.*, 2011) conduite avec un système similaire au nôtre et utilisant une matrice $\overline{\mathbf{B}}$ homogène avait montré qu'un impact positif important était obtenu en améliorant la qualité générale de l'ensemble utilisé pour calibrer un cette matrice sur une période de deux semaines (passage du mode "spin-up" au mode "assimilation d'ensemble"). Une seconde (Brousseau *et al.*, 2012) avait montré que l'utilisation de covariances du jour avait un impact positif, mais très limité par rapport à des covariances climatologiques calibrées sur la période de deux semaines. Dans notre cas, où les variances seules sont calibrées à chaque cycle, mais où les corrélations et les balances restent statiques, il semble que cette légère amélioration n'ait plus lieu. La calibration des opérateurs successifs de $\overline{\mathbf{B}}$ à partir de données différentes signifie que les phénomènes physiques échantillonnés ne sont pas les mêmes, surtout pour un modèle à aire limitée. Ceci pourrait dégrader la cohérence des covariances totales modélisées.

La matrice $\overline{\mathbf{B}}$ utilisant des variances hétérogènes permet d'inclure de l'information issue de l'ensemble AEARO dans le 3D-Var. Un certain nombre de développements autour de l'AEARO sont récents et spécifiques à l'échelle convective (ex. : perturbation des observations radar, inflation). Leur évaluation doit encore être poursuivie, en complément des questions posées sur la formulation interne de la matrice $\overline{\mathbf{B}}$ modélisée, qui pour l'instant diffère sensiblement d'une matrice $\widetilde{\mathbf{B}}$ échantillonnée.

Conclusions et perspectives

La problématique du bruit d'échantillonnage dans l'estimation des covariances d'erreur d'ébauche est transverse à toutes les méthodes d'ensemble. À échelle convective, les forts gradients et les fortes anisotropies rendent le filtrage de ces covariances encore plus délicat. Dans ce contexte, cette thèse a permis de développer des solutions de filtrage des variances et de localisation des covariances robustes et peu coûteuses.

Le premier chapitre de cette thèse a permis de présenter les fondements théoriques de l'assimilation de données. L'importance des covariances d'erreur d'ébauche et la pertinence des méthodes d'ensemble ont été particulièrement mises en relief.

Dans le second chapitre, basé sur l'article publié Ménétrier *et al.* (2014a), une assimilation d'ensemble de grande taille a permis de documenter les covariances d'erreur d'ébauche pour le 3D-Var du modèle à échelle convective AROME. Leur forte dépendance à la situation météorologique, déjà montrée par Montmerle et Berre (2010) et Brousseau *et al.* (2012), a été confirmée, ce qui montre l'intérêt de considérer des covariances dépendantes de l'écoulement. La taille de l'ensemble a aussi permis de constater et de quantifier les effets du sous-échantillonnage en estimant des covariances à partir de sous-ensembles indépendants de moindre taille. Tous ces diagnostics ont été comparés pour AROME et pour le modèle global ARPEGE. Comme attendu, les fortes différences des modèles et de leurs systèmes d'assimilation respectifs, principalement liées à leurs résolutions, sont à l'origine de différences notables dans les résultats, même si certaines structures de grande échelle communes ont pu être identifiées. Des structures de variances de plus forte amplitude et de plus fine échelle, notamment pour la vorticité et la divergence non balancée, ainsi que des corrélations locales bien plus anisotropes ont été montrées en particulier. Ces corrélations horizontales sont par exemple plus courtes sur les reliefs et dans les zones précipitantes que sur la mer, le tenseur LCH montrant des allongements plus ou moins marqués le long de l'écoulement, ainsi qu'une forte dépendance aux champs coupleurs sur les bords du domaine.

Les bases théoriques de l'estimation de moments centrés à partir d'un échantillon, ainsi que celles du filtrage linéaire optimal, ont ensuite été rappelées dans le troisième chapitre. Ceci a permis la démonstration de l'existence de critères d'optimalité d'un filtre linéaire ou d'un filtre de Schur appliqués à des covariances échantillonnées. L'idée principale qui sous-tend ces critères est que l'on ne filtre pas n'importe quelle quantité, mais des covariances échantillonnées, pour lesquelles le bruit d'échantillonnage a des propriétés statistiques connues. Ces critères ne sont basés que sur des quantités connues ou estimables de façon robuste, ce qui constitue leur principal avantage. Un autre intérêt vient de l'absence d'hypothèse d'ergodicité dans la théorie générale, celle-ci n'étant nécessaire qu'en dernière étape, et donc modulable selon les besoins de l'application. Le quatrième chapitre a présenté deux applications directes de ces critères d'optimalité, historiquement distinctes : le filtrage spatial des variances et la localisation des covariances. Une étape d'illustration a permis de valider conceptuellement ces applications dans un cadre idéalisé. L'utilisation des critères précédents pour le filtrage des variances a permis de garantir la positivité des variances filtrées au prix d'une légère sous-optimalité du filtrage. Les fonctions de localisation diagnostiquées par les nouvelles formules ont bien répondu aux attentes quant à leur adaptation à la taille de l'ensemble. Les paramètres impor-

tants du problème et leur impact sur la qualité du filtrage des variances ou de la localisation des covariances ont ainsi pu être mis en relief. Tous ces résultats ont été récemment soumis (Ménétrier *et al.*, 2014b).

Le cinquième chapitre rassemble les résultats principaux de l'application des critères d'optimalité pour le filtrage des variances et des tenseurs LCH, ainsi que pour la localisation de covariances dans un contexte de prévision numérique du temps. Un article a également été soumis à ce sujet (Ménétrier *et al.*, 2014c), en complément du précédent. L'ensemble AROME développé pour le diagnostic des covariances d'erreur d'ébauche a également permis de tester ces applications, et de les évaluer objectivement pour le filtrage des variances et des tenseurs. Il en ressort que le critère général 4.7 permet d'obtenir un filtrage homogène quasi optimal pour toutes les variables et tous les niveaux, dans le sens où il fournit la meilleure longueur de filtrage possible une fois la forme du noyau choisi. Sa version simplifiée en supposant que la distribution de l'ensemble est gaussienne fonctionne bien pour les variables vérifiant cette hypothèse (température et humidité spécifique non balancées), mais a tendance à largement sous-filtrer la vorticité et la divergence non balancée, du fait de leur forte non-gaussianité. Ces filtres itératifs semblent se comporter de manière plus robuste que le filtre adapté de Raynaud *et al.* (2009), en particulier pour la vorticité et la divergence non-balancée, tout en étant faciles à implémenter et à maintenir. Le filtrage des tenseurs LCH est apparu comme un prolongement naturel du filtrage des variances, plusieurs méthodes étant proposées pour filtrer le terme croisé. Cependant, le filtrage obtenu n'est pas optimal, particulièrement pour les petits ensembles, en raison d'une violation de l'hypothèse initiale d'indépendance des membres dans le calcul des covariances. Les tenseurs échantillonnés à partir d'un ensemble réduit sont toutefois bien plus proches de la référence après cette étape de filtrage. Le diagnostic de fonctions de localisation horizontales et verticales a montré une bonne cohérence avec la situation physique, ainsi qu'avec la taille de l'ensemble. À notre connaissance, il s'agit de la première méthode permettant une estimation objective de la localisation à partir de l'ensemble lui-même, et qui soit adaptée aux grandes dimensions des modèles de prévision numérique du temps. Cette méthode pourrait être exploitée dans de nombreux systèmes d'assimilation basés sur des ensembles, de types EnKF ou EnVar, où ces fonctions de localisation sont encore largement empiriques.

Dans un dernier chapitre, l'impact de l'introduction de variances hétérogènes échantillonnées par une assimilation d'ensemble (et potentiellement filtrées) dans un modèle de covariance a été évalué à la fois sur les covariances totales modélisées et sur les scores des prévisions subséquentes. Une première étape de diagnostic des covariances ainsi modélisées a mis en lumière l'impact considérable des variances hétérogènes spécifiées sur la structure et l'amplitude des covariances modélisées. On a montré que l'utilisation de variances brutes conduisait à des fonctions de covariance particulièrement bruitées. Le filtrage des variances permet de réduire ces effets, notamment pour s'approcher des covariances modélisées en utilisant des variances provenant d'un grand ensemble (et donc peu affectées par le bruit d'échantillonnage). Malgré tout, cette modélisation des covariances d'erreur d'ébauche ne permet pas de représenter de manière satisfaisante les covariances échantillonnées par un ensemble de grande taille. En plus de ces études diagnostiques, l'introduction des variances issues d'un ensemble de 6 membres a été testée pendant plus de 6 semaines dans le 3D-Var du modèle AROME. Cette expérience a permis d'une part de montrer la robustesse des filtres itératifs développés précédemment et leur dépendance à l'écoulement, et d'autre part d'évaluer l'apport de l'utilisation des variances estimées par l'ensemble pour l'analyse et la prévision. L'absence d'impact positif lors de l'utilisation de variances hétérogènes, les expériences basées sur des variances homogènes pour la vorticité et la divergence, ainsi que les expériences menées avec ou sans opérateur de balance, soulèvent de nombreuses questions, aucune des pistes évoquées n'étant *a priori* responsable

à elle seule des impacts négatifs. Bien qu'elle permette d'introduire de l'information issue de l'ensemble, la modélisation utilisée actuellement pour les covariances d'erreur d'ébauche devra être revisitée afin d'obtenir la dépendance à la situation météorologique souhaitée, et à terme un impact positif dans le système d'analyse et de prévision.

La non-spécificité des méthodes développées vis-à-vis d'un modèle ou d'un système d'assimilation permet d'imaginer de nombreuses applications dans la communauté ensembliste. Le coût de calcul raisonnable de ces méthodes les rend accessibles dans des systèmes opérationnels. Plus spécifiquement, le filtrage des variances peut être envisagé dans les algorithmes de type EnKF ou EnVar : la normalisation des perturbations de l'ensemble par le ratio des écarts-types filtrés et bruts permet en effet de rendre les variances de l'ensemble ainsi normalisé égales aux variances filtrées. Comme il s'agit d'une multiplication point à point, les effets de cette normalisation sur les balances de l'ensemble devront être étudiés avec soin. Pour les tenseurs LCH, le filtrage objectif (quoique non optimal) devrait permettre une meilleure précision des modèles de corrélation utilisant ces tenseurs. On peut penser d'une part aux modèles océanographiques pour lesquels la complexité des frontières du domaine encourage une modélisation des corrélations par diffusion (Mirouze et Weaver, 2010), et d'autre part à des approches utilisant les tenseurs pour déformer la grille et rendre les covariances quasi homogènes (Michel, 2012a,b). L'estimation des localisations horizontale et verticale par la nouvelle méthode basée sur l'ensemble doit encore faire ses preuves dans un schéma d'assimilation réaliste, et être confrontée aux autres méthodes existantes, mais les premiers tests engagés semblent prometteurs.

L'introduction de variances déduites d'un ensemble dans un modèle de covariances d'erreur d'ébauche à l'échelle convective se heurte quant à elle à des difficultés importantes, telle qu'elle est implémentée actuellement. Cette utilisation semble en effet conduire à des effets neutres à négatifs sur les scores, tandis que les différences avec les covariances issues d'un grand ensemble restent significatives. Plusieurs pistes pourraient être envisagées afin d'améliorer cette situation. Cela pourrait comprendre l'utilisation de variables dynamiques de plus grande échelle que la vorticité et la divergence, dont les effets sur le spin-up, sur les incréments de vent et sur les scores ont été mis en évidence. Une autre source d'améliorations pourrait être une modification de la calibration des balances, qui pourrait être faite de façon dépendante à la situation via l'ensemble. La formulation des balances à l'échelle convective pourrait aussi être revisitée, par exemple en comparant des formulations en spectral, en ondelettes ou dans l'espace physique. Il serait également bénéfique de mieux tenir compte de certaines spécificités des balances à l'échelle convective (Pagé *et al.*, 2007; Vetra-Carvalho *et al.*, 2012). L'approche hétérogène par masques géographiques de Montmerle et Berre (2010) et Ménétrier et Montmerle (2011) permettrait aussi de conserver la cohérence des covariances modélisées. Enfin, l'utilisation d'une fonction coût hybride pourrait permettre de conserver le formalisme variationnel et ses points forts, tout en incluant de façon plus explicite des covariances d'erreur d'ébauche issues d'un ensemble. Les solutions de filtrage des covariances apportées par cette thèse pourraient s'avérer fructueuses au sein de cette approche, qui semble prometteuse.

A | Annexes

Sommaire

A.1 Tenseurs de la hessienne de la corrélation locale (LCH) 159
A.1.1 Définitions générales 159
A.1.2 Estimation dans le cas continu 161
A.1.3 Estimation dans le cas discret 163
A.2 Estimation des moments centrés : théorie et pratique 164
A.2.1 Dérivation des moments dans la théorie de Wishart 164
A.2.2 Nouvel estimateur des covariances 164
A.2.3 Espérance et covariance de $\widetilde{\mathbf{B}}$ 165
A.2.4 Espérance de $\widetilde{\boldsymbol{\Xi}}$ 167
A.2.5 Formule d'estimation itérative des moments centrés 168
A.2.6 Calcul itératif du moment centré d'ordre quatre multivarié 170
A.3 Théorie du filtrage linéaire optimal 171
A.3.1 Changement de base du filtre optimal 171
A.3.2 Diagonalisation du gain du filtre optimal 171
A.4 Filtrage linéaire optimal des covariances 173
A.4.1 Moments centrés aléatoires 173
A.4.2 Critères de filtrage linéaire optimal des covariances 174
A.4.3 Unicité des critères de filtrage des variances 176
A.5 Longueur de portée d'une fonction hypergaussienne 177
A.6 Propriétés de l'inflation estimée 178

A.1. Tenseurs de la hessienne de la corrélation locale (LCH)

A.1.1. Définitions générales

Tenseur

On se place dans l'espace physique à d dimensions, où le vecteur $\mathbf{r}$ de taille d contient les coordonnées :

$$\mathbf{r} = (x_1, ..., x_d)^{\mathrm{T}} \tag{A.1}$$

Soit $C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ une fonction de corrélation entre les lieux $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$, que l'on suppose deux fois dérivable. Le tenseur de la hessienne de la corrélation locale (tenseur LCH) est défini dans Weaver et Mirouze (2012) par :

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{r}) = -\nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}'}^{\mathrm{T}} C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \tag{A.2}$$

Il s'agit d'une matrice de taille $d \times d$, contenant en chaque point $\mathbf{r}$ les dérivées secondes de la fonction $b(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ par rapport à $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$. La composante d'indices (α, β) de $\boldsymbol{H}(\mathbf{r})$ vaut :

$$H_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = -\frac{\partial^2 C(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{\partial x_\alpha \partial x'_\beta}\bigg|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \tag{A.3}$$

D'après le théorème de Schwarz, les dérivées partielles commutent, donc le tenseur est symétrique :

$$H_{\beta\alpha}(\mathbf{r}) = H_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) \tag{A.4}$$

Le point $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ est un point critique de la fonction de corrélation, où son gradient s'annule. Comme il s'agit d'un maximum, la matrice hessienne est définie négative (théorie de Morse), et le tenseur LCH est donc défini positif.

Longueur de portée

La longueur de portée est définie dans Daley (1991) pour une fonction homogène et isotrope $\overline{C}(\Delta r)$ avec $\Delta r = \|\mathbf{r} - \mathbf{r}'\|$ par :

$$\mathcal{L}^b_{\text{Daley}} = \sqrt{-\frac{d}{\nabla^2 \overline{C}|_{\Delta r=0}}} \tag{A.5}$$

Une généralisation pour les fonctions hétérogènes et anisotropes est donnée dans Ménétrier *et al.* (2014a), à l'aide du tenseur LCH. Ce tenseur étant défini positif, il peut être diagonalisé dans une base de vecteurs propres $\mathbf{e}_\gamma$ orthonormaux, correspondant aux valeurs propres λ_γ, strictement positives. Dans chaque direction $\mathbf{e}_\gamma$, on peut définir une longueur de portée partielle :

$$\mathcal{L}^b_\gamma = \lambda_\gamma^{-1/2} \tag{A.6}$$

La longueur de portée totale peut être définie comme la moyenne géométrique des longueurs de portée partielles :

$$\mathcal{L}^b = \Big(\prod_{\gamma=1}^{d} \mathcal{L}^b_\gamma \Big)^{1/d} = \det(\boldsymbol{H})^{-1/(2d)} \tag{A.7}$$

Ainsi, la longueur de portée totale est telle que la sphère de rayon $\mathcal{L}^b$ a le même volume que l'ellipsoïde défini par les semi-axes $\mathcal{L}^b_\gamma$. Dans un cas 2D, il est possible de représenter les tenseurs LCH par des ellipses dont les directions principales sont les vecteurs propres $\mathbf{e}_\gamma$ et les semi-axes les longueurs de portée partielles $\mathcal{L}^b_\gamma$.

Dans le cas d'une fonction homogène et isotrope :

$$\left.\frac{\partial^2 \overline{C}}{\partial x_\alpha \partial x'_\beta}\right|_{\Delta r=0} = \begin{cases} -D^{-2} & \text{si} \quad \alpha = \beta \\ 0 & \text{si} \quad \alpha \neq \beta \end{cases} \tag{A.8}$$

où D est une constante positive ayant la dimension physique d'une distance. La longueur de portée au sens de l'équation A.7 vaut donc :

$$\mathcal{L}^b = \left(\left(D^{-2}\right)^d \right)^{-1/(2d)} = D \tag{A.9}$$

tandis que la longueur de portée selon Daley (1991) vaut :

$$\mathcal{L}^b_{\text{Daley}} = \sqrt{\frac{d}{d \times D^{-2}}} = D \tag{A.10}$$

Les deux formulations sont donc équivalentes dans le cas homogène et isotrope.

A.1.2. Estimation dans le cas continu

L'objectif de cette section est d'exprimer les composantes des tenseurs LCH en utilisant uniquement l'erreur d'ébauche $\varepsilon^b(\mathbf{r})$ et son écart-type $\sigma^b(\mathbf{r})$, et non plus la fonction de corrélation $C(\mathbf{r},\mathbf{r}')$.

Méthode de Belo Pereira et Berre (2006)

Par définition de la fonction de covariance $B(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \mathbb{E}[\varepsilon^b(\mathbf{r})\varepsilon^b(\mathbf{r}')]$, on a :

$$B(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sigma^b(\mathbf{r})\sigma^b(\mathbf{r}')C(\mathbf{r},\mathbf{r}') \tag{A.11}$$

La dérivée seconde de $B(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ par rapport à x_α et x'_β est :

$$\frac{\partial^2 B(\mathbf{r},\mathbf{r}')}{\partial x_\alpha \partial x'_\beta} = \mathbb{E}\left[\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r}')}{\partial x'_\beta}\right] \tag{A.12}$$

Celle de $\sigma^b(\mathbf{r})\sigma^b(\mathbf{r}')C(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ vaut :

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x'_\beta}\Big(\sigma^b(\mathbf{r})\sigma^b(\mathbf{r}')C(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Big) &= \frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r}')}{\partial x'_\beta}C(\mathbf{r},\mathbf{r}') + \frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\sigma^b(\mathbf{r}')\frac{\partial C(\mathbf{r},\mathbf{r}')}{\partial x'_\beta} \\ &\quad + \sigma^b(\mathbf{r})\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r}')}{\partial x'_\beta}\frac{\partial C(\mathbf{r},\mathbf{r}')}{\partial x_\alpha} + \sigma^b(\mathbf{r})\sigma^b(\mathbf{r}')\frac{\partial^2 C(\mathbf{r},\mathbf{r}')}{\partial x_\alpha \partial x'_\beta}\end{aligned} \tag{A.13}$$

mais en $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$:

$$C(\mathbf{r},\mathbf{r}) = 1 \tag{A.14a}$$

$$\nabla C(\mathbf{r},\mathbf{r}')\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = 0 \tag{A.14b}$$

d'où :

$$\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha \partial x'_\beta}\Big(\sigma^b(\mathbf{r})\sigma^b(\mathbf{r}')C(\mathbf{r},\mathbf{r}')\Big)\Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = \frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta} + \sigma^b(\mathbf{r})^2\frac{\partial^2 C(\mathbf{r},\mathbf{r}')}{\partial x_\alpha \partial x'_\beta}\Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} \tag{A.15}$$

En combinant les équations A.11, A.12 et A.15, la composante d'indices (α,β) du tenseur vaut :

$$H_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \sigma^b(\mathbf{r})^{-2}\left(\mathbb{E}\left[\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta}\right] - \frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta}\right) \tag{A.16}$$

Méthode de Michel (2012b)

La dérivée spatiale de l'erreur d'ébauche normalisée par son écart-type vaut :

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right) = \frac{1}{\sigma^b(\mathbf{r})}\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} - \frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})^2}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} \tag{A.17}$$

Comme l'espérance et les dérivations spatiales commutent, l'absence de biais de l'erreur d'ébauche $\mathbb{E}[\varepsilon^b(\mathbf{r})] = 0$ implique que :

$$\mathbb{E}[\nabla \varepsilon^b(\mathbf{r})] = 0 \tag{A.18}$$

La quantité de l'équation A.17 est donc d'espérance nulle :

$$\mathbb{E}\left[\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right)\right] = \frac{1}{\sigma^b(\mathbf{r})}\mathbb{E}\left[\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\right] - \frac{\mathbb{E}[\varepsilon^b(\mathbf{r})]}{\sigma^b(\mathbf{r})^2)}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} = 0 \tag{A.19}$$

On a donc :

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Cov}\left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right), \frac{\partial}{\partial x_\beta}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right)\right) \\
&= \mathbb{E}\left[\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right)\frac{\partial}{\partial x_\beta}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right)\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\left(\frac{1}{\sigma^b(\mathbf{r})}\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} - \frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})^2}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\right)\left(\frac{1}{\sigma^b(\mathbf{r})}\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta} - \frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})^2}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta}\right)\right] \\
&= \sigma^b(\mathbf{r})^{-2}\left(\mathbb{E}\left[\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta}\right] + \sigma^b(\mathbf{r})\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta}\right. \\
&\qquad \left. - \frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\mathbb{E}\left[\varepsilon^b(\mathbf{r})\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta}\right] - \frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta}\mathbb{E}\left[\varepsilon^b(\mathbf{r})\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\right]\right)
\end{aligned} \tag{A.20}$$

On utilise le fait que :

$$\mathbb{E}\left[\varepsilon^b(\mathbf{r})\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\right] = \mathbb{E}\left[\frac{1}{2}\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})^2}{\partial x_\alpha}\right] = \frac{1}{2}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})^2}{\partial x_\alpha} = \sigma^b(\mathbf{r})\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha} \tag{A.21}$$

Pour obtenir :

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Cov}\left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right), \frac{\partial}{\partial x_\beta}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right)\right) \\
&= \sigma^b(\mathbf{r})^{-2}\left(\mathbb{E}\left[\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\frac{\partial \varepsilon^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta}\right] - \frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\alpha}\frac{\partial \sigma^b(\mathbf{r})}{\partial x_\beta}\right)
\end{aligned} \tag{A.22}$$

Ainsi, la composante d'indices (α, β) du tenseur vaut :

$$H_{\alpha\beta}(\mathbf{r}) = \mathrm{Cov}\left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right), \frac{\partial}{\partial x_\beta}\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right)\right) \tag{A.23}$$

soit sous la forme d'une matrice de covariance :

$$\boldsymbol{H}(\mathbf{r}) = \mathrm{Cov}\left(\nabla\left(\frac{\varepsilon^b(\mathbf{r})}{\sigma^b(\mathbf{r})}\right)\right) \tag{A.24}$$

On retrouve ainsi que les tenseurs LCH sont nécessairement définis positifs.

A.1.3. Estimation dans le cas discret

Discrétisation spatiale

Dans le cas discret, les fonctions $\varepsilon(\mathbf{r})$ et $\sigma(\mathbf{r})$ sont remplacée par des vecteurs $\boldsymbol{\varepsilon}$ et $\boldsymbol{\sigma}$. La dérivation continue est remplacée par un opérateur linéaire de différentiation $\boldsymbol{D}$:

$$\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \to \boldsymbol{D}_{\alpha} \tag{A.25}$$

En notant $H_{\alpha\beta|i}$ la composante d'indices (α, β) du tenseur $\boldsymbol{H}$ au point d'indice i, les formulations A.16 et A.24 deviennent respectivement :

$$H^{\mathrm{BPB}}_{\alpha\beta|i} = (\sigma^b_i)^{-2}\Big(\mathbb{E}\Big[(\boldsymbol{D}_{\alpha}\boldsymbol{\varepsilon}^b)_i(\boldsymbol{D}_{\beta}\boldsymbol{\varepsilon}^b)_i\Big] - (\boldsymbol{D}_{\alpha}\boldsymbol{\sigma}^b)_i(\boldsymbol{D}_{\beta}\boldsymbol{\sigma}^b)_i\Big) \tag{A.26a}$$

$$H^{\mathrm{M}}_{\alpha\beta|i} = \mathrm{Cov}\left(\left(\boldsymbol{D}_{\alpha}\left(\frac{\boldsymbol{\varepsilon}^b}{\boldsymbol{\sigma}^b}\right)\right)_i, \left(\boldsymbol{D}_{\beta}\left(\frac{\boldsymbol{\varepsilon}^b}{\boldsymbol{\sigma}^b}\right)\right)_i\right) \tag{A.26b}$$

où le rapport $\boldsymbol{\varepsilon}^b/\boldsymbol{\sigma}^b$ s'entend comme une division terme à terme des vecteurs.

Comme l'opérateur de différentiation n'est plus continu : $\boldsymbol{H}^{\mathrm{BPB}} \neq \boldsymbol{H}^{\mathrm{M}}$.

Estimation à partir de l'ensemble

Les deux formulations précédentes peuvent être utilisées pour estimer les tenseurs LCH à partir d'un ensemble de N membres $\{\widetilde{\mathbf{x}}^b_p\}_{1\leq p\leq N}$. En notant Cov_N un estimateur de la covariance par un ensemble de N membres et $\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b$ le vecteur des écarts-types estimés, on obtient :

$$\widetilde{H}^{\mathrm{BPB}}_{\alpha\beta|i} = (\widetilde{\sigma}^b_i)^{-2}\Big(\mathrm{Cov}_N\left((\boldsymbol{D}_{\alpha}\widetilde{\mathbf{x}}^b)_i, (\boldsymbol{D}_{\beta}\widetilde{\mathbf{x}}^b)_i\right) - (\boldsymbol{D}_{\alpha}\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b)_i(\boldsymbol{D}_{\beta}\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b)_i\Big) \tag{A.27a}$$

$$\widetilde{H}^{\mathrm{M}}_{\alpha\beta|i} = \mathrm{Cov}_N\left(\left(\boldsymbol{D}_{\alpha}\left(\frac{\widetilde{\mathbf{x}}^b}{\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b}\right)\right)_i, \left(\boldsymbol{D}_{\beta}\left(\frac{\widetilde{\mathbf{x}}^b}{\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b}\right)_i\right)\right) \tag{A.27b}$$

En général, l'estimation $\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b$ de $\boldsymbol{\sigma}^b$ est biaisée : elle sous-estime $\boldsymbol{\sigma}^b$. Dans le cas où la distribution de $\widetilde{\mathbf{x}}^b$ est gaussienne, ce biais est connu :

$$\mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{\sigma}}^b] = \sqrt{\frac{2}{N-1}}\frac{\Gamma(\frac{N}{2})}{\Gamma(\frac{N-1}{2})}\boldsymbol{\sigma}^b \tag{A.28}$$

et il est donc possible de le corriger. Dans le cas général, ce biais est inconnu, mais on peut appliquer la correction du cas gaussien en première approximation.

Comme on le précise dans le chapitre 2, les formules d'estimation A.27a et A.27b ne sont pas équivalentes. Dans le premier cas, le caractère défini positif du tenseur estimé n'est pas garanti, alors qu'il l'est dans le second par construction.

A.2. Estimation des moments centrés : théorie et pratique

A.2.1. Dérivation des moments dans la théorie de Wishart

Pour le calcul des moments, il est pratique d'utiliser la formule de Leibniz, qui permet d'exprimer le déterminant d'une matrice $\mathbf{A}$ de taille $n \times n$:

$$\det(\mathbf{A}) = \sum_{\sigma \in P_n} \operatorname{sgn}(\sigma) \prod_{i=1}^{n} A_{i\sigma(i)} \tag{A.29}$$

où la somme s'effectue sur l'ensemble P_n des permutations σ du vecteur $(1, 2, ..., n)$, et où le signe de σ est défini par la parité du nombre de permutations élémentaires pour obtenir σ (pair : 1, impair : -1).

La méthode de calcul des moments est alors la suivante :

1. développement de $\det\left(\mathbf{I} - \mathbf{\Gamma}\widetilde{\mathbf{B}}^{\star}\right)$ par la formule de Leibniz, en mettant en exergue les termes en Θ_{ij} pertinents (sans oublier que $\Theta_{ji} = \Theta_{ij}$),
2. dérivations successives de ce polynôme, au maximum d'ordre deux en Θ_{ij},
3. reconstitution de la dérivation adéquate de la fonction génératrice des moments,
4. annulation de $\mathbf{\Theta}$: l'apparition de produits de $\delta_{i\sigma(i)}$ permet d'annuler la quasi-totalité des permutations de P_n, ne laissant que quelques termes.

A.2.2. Nouvel estimateur des covariances

Dans la suite, les entiers $\{i, j\}$ indicent les éléments d'un vecteur donné et les entiers $\{p, q, r\}$ indicent les membres de l'ensemble.

On remarque qu'il est possible d'exprimer :

$$\begin{aligned} \widetilde{x}^{b}_{i,p} - \langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle &= \widetilde{x}^{b}_{i,p} - \frac{1}{N} \sum_{q=1}^{N} \widetilde{x}^{b}_{i,q} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{q=1}^{N} \left(\widetilde{x}^{b}_{i,p} - \widetilde{x}^{b}_{i,q} \right) \end{aligned} \tag{A.30}$$

La somme S_{ij} définie par :

$$S_{ij} = \sum_{p=1}^{N} \left(\widetilde{x}^{b}_{i,p} - \langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle \right) \left(\widetilde{x}^{b}_{j,p} - \langle \widetilde{x}^{b}_{j} \rangle \right) \tag{A.31}$$

peut donc être transformée en :

$$S_{ij} = \frac{1}{N^2} \sum_{1 \leq p,q,r \leq N} \left(\widetilde{x}^{b}_{i,p} - \widetilde{x}^{b}_{i,q} \right) \left(\widetilde{x}^{b}_{j,p} - \widetilde{x}^{b}_{j,r} \right) \tag{A.32}$$

En notant que le cas $p = q$ n'apporte aucune contribution dans la somme, on peut exprimer S_{ij} par :

$$S_{ij} = \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{1 \leq p < q \leq N \\ 1 \leq r \leq N}} \Big((\widetilde{x}^b_{i,p} - \widetilde{x}^b_{i,q})(\widetilde{x}^b_{j,p} - \widetilde{x}^b_{j,r}) + (\widetilde{x}^b_{i,q} - \widetilde{x}^b_{i,p})(\widetilde{x}^b_{j,q} - \widetilde{x}^b_{j,r}) \Big) \tag{A.33}$$

Ceci se factorise en :

$$\begin{aligned} S_{ij} &= \frac{1}{N^2} \sum_{\substack{1 \leq p < q \leq N \\ 1 \leq r \leq N}} (\widetilde{x}^b_{i,p} - \widetilde{x}^b_{i,q})(\widetilde{x}^b_{j,p} - \widetilde{x}^b_{j,q}) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{1 \leq p < q \leq N} (\widetilde{x}^b_{i,p} - \widetilde{x}^b_{i,q})(\widetilde{x}^b_{j,p} - \widetilde{x}^b_{j,q}) \end{aligned} \tag{A.34}$$

On obtient alors le nouvel estimateur de la covariance, parfaitement égal à celui de l'équation 3.5a :

$$\widetilde{B}_{ij} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{1 \leq p < q \leq N} (\widetilde{x}^b_{i,p} - \widetilde{x}^b_{i,q})(\widetilde{x}^b_{j,p} - \widetilde{x}^b_{j,q}) \tag{A.35}$$

A.2.3. Espérance et covariance de $\widetilde{\mathbf{B}}$

Comme on travaille avec des moments centrés, il est possible de simplifier les calculs en utilisant les écarts des membres de l'ensemble par rapport à leur espérance :

$$\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_p = \widetilde{\mathbf{x}}^b_p - \mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{x}}^b_p] \tag{A.36}$$

L'estimateur 3.22 de la covariance devient alors :

$$\widetilde{\mathbf{B}} = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{1 \leq p < q \leq N} (\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{i,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{j,q}) \tag{A.37}$$

Par définition, les $\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_p$ de l'ensemble ont une espérance nulle, des moments centrés égaux à ceux de $\boldsymbol{\varepsilon}^b$, et sont indépendants deux à deux, au sens où la perturbation $\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_p$ est indépendante de l'indice p. En résumé :

$$\mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{i,p}] = 0 \tag{A.38a}$$

$$\mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{i,p} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{j,p}] = \widetilde{B}^\star_{ij} \tag{A.38b}$$

$$\mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{i,p} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{j,p} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{k,p} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{l,p}] = \widetilde{\Xi}^\star_{ij} \tag{A.38c}$$

$$\mathbb{E}\Big[\prod_p \prod_{i_p} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{i_p,p} \Big] = \prod_p \mathbb{E}\Big[\prod_{i_p} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{i_p,p} \Big] \tag{A.38d}$$

Dans la suite, les entiers $\{i, j, k, l\}$ indicent les éléments d'un vecteur donné et les entiers $\{p, q, r, s\}$ indicent les membres de l'ensemble.

L'espérance d'une covariance $\widetilde{B}_{ij}$ donnée par le nouvel estimateur 3.22 vaut :

$$\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}] = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{1 \leq p < q \leq N} \Big(\mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{i,p} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{j,p}] + \mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{i,q} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{j,q}] - \mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{i,p} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{j,q}] - \mathbb{E}[\widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{i,q} \widetilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^b_{j,p}] \Big) \tag{A.39}$$

Or, d'après les propriétés A.38b et A.38d :

$$\mathbb{E}\big[\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p}\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p}\big] = \mathbb{E}\big[\widetilde{\varepsilon}^b_{i,q}\widetilde{\varepsilon}^b_{j,q}\big] = \widetilde{B}^\star_{ij} \tag{A.40a}$$

$$\mathbb{E}\big[\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p}\widetilde{\varepsilon}^b_{j,q}\big] = \mathbb{E}\big[\widetilde{\varepsilon}^b_{i,q}\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p}\big] = 0 \tag{A.40b}$$

Comme le cardinal de l'ensemble $\{1 \leq p < q \leq N\}$ vaut $N(N-1)/2$, on obtient :

$$\mathbb{E}\big[\widetilde{B}_{ij}\big] = \widetilde{B}^\star_{ij} \tag{A.41}$$

En utilisant cette propriété, la covariance de deux covariances estimées par 3.22 est donnée par :

$$\begin{aligned}
\mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}_{ij},\widetilde{B}_{kl}) &= \mathbb{E}\Big[(\widetilde{B}_{ij} - \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}])(\widetilde{B}_{kl} - \mathbb{E}[\widetilde{B}_{kl}])\Big] \\
&= \mathbb{E}\Big[\Big(\frac{1}{N(N-1)}\sum_{1\leq p<q\leq N}(\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{i,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{j,q}) - \widetilde{B}^\star_{ij}\Big) \\
&\qquad \times \Big(\frac{1}{N(N-1)}\sum_{1\leq r<s\leq N}(\widetilde{\varepsilon}^b_{k,r} - \widetilde{\varepsilon}^b_{k,s})(\widetilde{\varepsilon}^b_{l,r} - \widetilde{\varepsilon}^b_{l,s}) - \widetilde{B}^\star_{kl}\Big)\Big] \\
&= \frac{4}{N^2(N-1)^2}\sum_{\substack{1\leq p<q\leq N\\ 1\leq r<s\leq N}}\mathbb{E}\Big[\Big(\frac{1}{2}(\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{i,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{j,q}) - \widetilde{B}^\star_{ij}\Big) \\
&\qquad\qquad \times \Big(\frac{1}{2}(\widetilde{\varepsilon}^b_{k,r} - \widetilde{\varepsilon}^b_{k,s})(\widetilde{\varepsilon}^b_{l,r} - \widetilde{\varepsilon}^b_{l,s}) - \widetilde{B}^\star_{kl}\Big)\Big]
\end{aligned} \tag{A.42}$$

La somme sur les paires d'indices $\{p,q\}$ et $\{r,s\}$ peut être séparée en trois parties, en fonction du cardinal de l'intersection $\{p,q\} \cap \{r,s\}$, qui ne peut prendre que les valeurs 0, 1 ou 2. Les termes correspondants sont détaillés dans la suite.

Cependant, il est à noter que les perturbations de l'ensemble sont indépendantes (propriété A.38d) et que leur espérance est nulle (propriété A.38a). En conséquence, l'espérance du produit de plusieurs éléments des perturbations s'annule dès que l'une de perturbations n'est présente qu'une seule fois dans le produit. Les combinaisons qui s'annulent de la sorte ne seront plus explicitement mentionnées dans la suite. D'autre part, les propriétés A.38b et A.38c permettent d'obtenir les covariances asymptotiques et le moment centré d'ordre quatre asymptotique.

1. Premier cas : $|\{i,j\} \cap \{k,l\}| = 0$
   Si l'intersection est vide, l'espérance du produit s'annule, car les perturbations sont indépendantes :

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\Big[\Big(\frac{1}{2}(\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{i,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{j,q}) - \widetilde{B}^\star_{ij}\Big)\Big(\frac{1}{2}(\widetilde{\varepsilon}^b_{k,r} - \widetilde{\varepsilon}^b_{k,s})(\widetilde{\varepsilon}^b_{l,r} - \widetilde{\varepsilon}^b_{l,s}) - \widetilde{B}^\star_{kl}\Big)\Big] \\
&= \Big(\frac{1}{2}\mathbb{E}\Big[(\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{i,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p} - \widetilde{\varepsilon}^b_{j,q})\Big] - \widetilde{B}^\star_{ij}\Big)\Big(\frac{1}{2}\mathbb{E}\Big[(\widetilde{\varepsilon}^b_{k,r} - \widetilde{\varepsilon}^b_{k,s})(\widetilde{\varepsilon}^b_{l,r} - \widetilde{\varepsilon}^b_{l,s})\Big] - \widetilde{B}^\star_{kl}\Big) \\
&= \Big(\widetilde{B}^\star_{ij} - \widetilde{B}^\star_{ij}\Big)\Big(\widetilde{B}^\star_{kl} - \widetilde{B}^\star_{kl}\Big) \\
&= 0
\end{aligned} \tag{A.43}$$

2. Second cas : $|\{i,j\} \cap \{k,l\}| = 1$
   Il y a $N(N-1)(N-2)$ termes tels que $|\{i,j\} \cap \{k,l\}| = 1$. À une permutation des

indices près, ces termes valent tous :

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left[\left(\frac{1}{2}(\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{i,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{j,q})-\widetilde{B}^\star_{ij}\right)\left(\frac{1}{2}(\widetilde{\varepsilon}^b_{k,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{k,s})(\widetilde{\varepsilon}^b_{l,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{l,s})-\widetilde{B}^\star_{kl}\right)\right]\\
&=\frac{1}{4}\Big(\mathbb{E}\big[\varepsilon^b_i\varepsilon^b_j\varepsilon^b_k\varepsilon^b_l\big]+3\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}\Big)-\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}\\
&=\frac{1}{4}\Big(\widetilde{\Xi}^\star_{ijkl}-\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}\Big)
\end{aligned}\tag{A.44}$$

3. Troisième cas : $|\{i,j\}\cap\{k,l\}|=2$
   Il y a $N(N-1)/2$ termes tels que $|\{i,j\}\cap\{k,l\}|=2$. À une permutation des indices près, ces termes valent tous :

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left[\left(\frac{1}{2}(\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{i,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{j,q})-\widetilde{B}^\star_{ij}\right)\left(\frac{1}{2}(\widetilde{\varepsilon}^b_{k,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{k,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{l,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{l,q})-\widetilde{B}^\star_{kl}\right)\right]\\
&=\frac{1}{4}\Big(2\mathbb{E}\big[\varepsilon^b_i\varepsilon^b_j\varepsilon^b_k\varepsilon^b_l\big]+2\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}+2\widetilde{B}^\star_{ik}\widetilde{B}^\star_{jl}+2\widetilde{B}^\star_{il}\widetilde{B}^\star_{jk}\Big)-\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}\\
&=\frac{1}{2}\Big(\widetilde{\Xi}^\star_{ijkl}+\widetilde{B}^\star_{ik}\widetilde{B}^\star_{jl}+\widetilde{B}^\star_{il}\widetilde{B}^\star_{jk}-\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}\Big)
\end{aligned}\tag{A.45}$$

En rassemblant tous les termes, on obtient :

$$\begin{aligned}
\mathrm{Cov}\,(\widetilde{B}_{ij},\widetilde{B}_{kl})&=\frac{4}{N^2(N-1)^2}\Bigg(\frac{N(N-1)(N-2)}{4}(\widetilde{\Xi}^\star_{ijkl}-\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl})\\
&\qquad+\frac{N(N-1)}{4}(\widetilde{\Xi}^\star_{ijkl}+\widetilde{B}^\star_{ik}\widetilde{B}^\star_{jl}+\widetilde{B}^\star_{il}\widetilde{B}^\star_{jk}-\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl})\Bigg)\\
&=\frac{4}{N^2(N-1)^2}\Bigg(\frac{N(N-1)^2}{4}\widetilde{\Xi}^\star_{ijkl}-\frac{N(N-1)^2}{4}\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}\\
&\qquad+\frac{N(N-1)}{4}\Big(\widetilde{B}^\star_{ik}\widetilde{B}^\star_{jl}+\widetilde{B}^\star_{il}\widetilde{B}^\star_{jk}\Big)\Bigg)\\
&=\frac{1}{N}\widetilde{\Xi}^\star_{ijkl}-\frac{1}{N}\widetilde{B}^\star_{ij}\widetilde{B}^\star_{kl}+\frac{1}{N(N-1)}\Big(\widetilde{B}^\star_{ik}\widetilde{B}^\star_{jl}+\widetilde{B}^\star_{il}\widetilde{B}^\star_{jk}\Big)
\end{aligned}\tag{A.46}$$

A.2.4. Espérance de $\widetilde{\Xi}$

Dans la suite, les entiers $\{i,j,k,l\}$ indicent les éléments d'un vecteur donné et les entiers $\{p,q,r,s,t\}$ indicent les membres de l'ensemble.

En utilisant le résultat de l'équation A.30, l'estimation du moment centré d'ordre quatre donnée par 3.5b peut être exprimée par :

$$\widetilde{\Xi}_{ijkl}=\frac{1}{N^5}\sum_{1\le p,q,r,s,t\le N}(\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{i,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{j,r})(\widetilde{\varepsilon}^b_{k,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{k,s})(\widetilde{\varepsilon}^b_{l,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{l,t})\tag{A.47}$$

L'espérance de cette somme est donnée par :

$$\mathbb{E}\big[\widetilde{\Xi}_{ijkl}\big]=\frac{1}{N^5}\sum_{1\le p,q,r,s,t\le N}\mathbb{E}\Big[(\widetilde{\varepsilon}^b_{i,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{i,q})(\widetilde{\varepsilon}^b_{j,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{j,r})(\widetilde{\varepsilon}^b_{k,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{k,s})(\widetilde{\varepsilon}^b_{l,p}-\widetilde{\varepsilon}^b_{l,t})\Big]\tag{A.48}$$

Comme les perturbations de l'ensemble sont indépendantes (propriété A.38d) et que leur espérance est nulle (propriété A.38a), une grande partie des termes s'annulent, et il n'en reste

que deux types :

1. Le terme $\widetilde{\Xi}^{\star}_{ijkl}$ est présent par la propriété A.38c :
   — $N(N-1)^4$ fois par le produit $\widetilde{\varepsilon}^{b}_{i,p}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{j,p}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{k,p}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{l,p}$,
   — $N(N-1)$ fois par le produit $\widetilde{\varepsilon}^{b}_{i,q}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{j,r}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{k,s}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{l,t}$,
   soit $N^2(N-1)(N^2-3N+3)$ fois au total.
2. Le terme $\widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl}$ est présent par les propriétés A.38b et A.38d :
   — $N(N-1)^3$ fois par le produit $\widetilde{\varepsilon}^{b}_{i,p}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{j,p}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{k,s}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{l,t}$,
   — $N(N-1)^3$ fois par le produit $\widetilde{\varepsilon}^{b}_{i,q}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{j,r}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{k,p}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{l,p}$,
   — $N(N-1)(N-2)$ fois par le produit $\widetilde{\varepsilon}^{b}_{i,q}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{j,r}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{k,s}\widetilde{\varepsilon}^{b}_{l,t}$,
   soit $N^2(N-1)(2N-3)$ fois. Les termes $\widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl}$ et $\widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk}$ sont également présents le même nombre de fois.

Ainsi, l'espérance de $\widetilde{\widetilde{\Xi}}_{ijkl}$ vaut :

$$\mathbb{E}[\widetilde{\widetilde{\Xi}}_{ijkl}] = \frac{(N-1)(N^2-3N+3)}{N^3}\widetilde{\Xi}^{\star}_{ijkl} + \frac{(N-1)(2N-3)}{N^3}(\widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl} + \widetilde{B}^{\star}_{ik}\widetilde{B}^{\star}_{jl} + \widetilde{B}^{\star}_{il}\widetilde{B}^{\star}_{jk}) \quad \text{(A.49)}$$

A.2.5. Formule d'estimation itérative des moments centrés

La moyenne de l'ensemble est calculée avec N membres par :

$$\langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_N = \frac{1}{N}\sum_{p=1}^{N} \widetilde{x}^{b}_{i,p} \quad \text{(A.50)}$$

où l'indice N appliqué aux chevrons désigne la taille de l'ensemble sur lequel la moyenne est calculée. Elle peut être transformée en :

$$\begin{aligned}
\langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_N &= \frac{1}{N}(\widetilde{x}^{b}_{i,N} + \sum_{p=1}^{N-1} \widetilde{x}^{b}_{i,p}) \\
&= \frac{1}{N}(\widetilde{x}^{b}_{i,N} + (N-1)\langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_{N-1}) \\
&= \langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_N + \frac{1}{N}(\widetilde{x}^{b}_{i,N} - \langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_{N-1})
\end{aligned} \quad \text{(A.51)}$$

Ceci permet de mettre à jour $\langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_N$ à partir de $\langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_N$ et du nouveau membre $\widetilde{x}^{b}_{i,N}$.
De même, la somme $s_{\mathbf{k},N}$ définie par :

$$s_{\mathbf{k},N} = \sum_{p=1}^{N}\prod_{i=1}^{n}(\widetilde{x}^{b}_{i,p} - \langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_N)^{k_i} \quad \text{(A.52)}$$

où $\mathbf{k}$ est un vecteur d'entiers naturels de taille n, peut être séparée en deux termes :

$$s_{\mathbf{k},N} = \sum_{p=1}^{N-1}\prod_{i=1}^{n}(\widetilde{x}^{b}_{i,p} - \langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_N)^{k_i} + \prod_{i=1}^{n}(\widetilde{x}^{b}_{i,N} - \langle \widetilde{x}^{b}_{i} \rangle_N)^{k_i} \quad \text{(A.53)}$$

En utilisant l'équation 3.28 de récurrence pour la moyenne, puis la formule du binôme de Newton, le premier terme de A.53 peut être développé en :

$$\begin{aligned}
&\sum_{p=1}^{N-1}\prod_{i=1}^{n}(\widetilde{x}_{i,p}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N})^{k_i}\\
&=\sum_{p=1}^{N-1}\prod_{i=1}^{n}\Big(\widetilde{x}_{i,p}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1}-\frac{1}{N}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})\Big)^{k_i}\\
&=\sum_{p=1}^{N-1}\prod_{i=1}^{n}\sum_{m_i=0}^{k_i}\binom{k_i}{m_i}(\widetilde{x}_{i,p}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})^{m_i}(-\frac{1}{N}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1}))^{k_i-m_i}
\end{aligned}\tag{A.54}$$

où $\mathbf{m}$ est le vecteur de taille n contenant entiers naturels $m_1,\cdots,m_n$. En réorganisant les sommes pour extraire le facteur dépendant de p, on obtient :

$$\begin{aligned}
&\sum_{p=1}^{N-1}\prod_{i=1}^{n}(\widetilde{x}_{i,p}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N})^{k_i}\\
&=\sum_{p=1}^{N-1}\sum_{m_1=0}^{k_1}\cdots\sum_{m_n=0}^{k_n}\prod_{i=1}^{n}\left(\binom{k_i}{m_i}\left(\frac{-1}{N}\right)^{k_i-m_i}(\widetilde{x}_{i,p}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})^{m_i}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})^{k_i-m_i}\right)\\
&=\sum_{m_1=0}^{k_1}\cdots\sum_{m_n=0}^{k_n}\left(\frac{-1}{N}\right)^{\sum_{i=1}^{n}(k_i-m_i)}\prod_{i=1}^{n}\left(\binom{k_i}{m_i}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})^{k_i-m_i}\right)\times\\
&\quad\sum_{p=1}^{N-1}\prod_{i=1}^{n}(\widetilde{x}_{i,p}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})^{m_i}\\
&=\sum_{m_1=0}^{k_1}\cdots\sum_{m_n=0}^{k_n}\left(\frac{-1}{N}\right)^{\sum_{i=1}^{n}(k_i-m_i)}\prod_{i=1}^{n}\left(\binom{k_i}{m_i}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})^{k_i-m_i}\right)s_{\mathbf{m},N-1}
\end{aligned}\tag{A.55}$$

Le second terme de A.53 est simplement modifié en :

$$\begin{aligned}
\prod_{i=1}^{n}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N})^{k_i}&=\prod_{i=1}^{n}\left(\frac{N-1}{N}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})\right)^{k_i}\\
&=\left(\frac{N-1}{N}\right)^{\sum_{i=1}^{n}k_i}\prod_{i=1}^{n}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})^{k_i}
\end{aligned}\tag{A.56}$$

d'où en rassemblant les deux termes :

$$\begin{aligned}
s_{\mathbf{k},N}=&\sum_{m_1=0}^{k_1}\cdots\sum_{m_n=0}^{k_n}\left(\frac{-1}{N}\right)^{\sum_{i=1}^{n}(k_i-m_i)}\prod_{i=1}^{n}\left(\binom{k_i}{m_i}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})^{k_i-m_i}\right)s_{\mathbf{m},N-1}\\
&+\left(\frac{N-1}{N}\right)^{\sum_{i=1}^{n}k_i}\prod_{i=1}^{n}(\widetilde{x}_{i,N}^{b}-\langle\widetilde{x}_{i}^{b}\rangle_{N-1})^{k_i}
\end{aligned}\tag{A.57}$$

A.2.6. Calcul itératif du moment centré d'ordre quatre multivarié

Pour rendre les notations plus compactes, on définit un opérateur pouvant prendre autant d'entiers que nécessaire comme arguments, tel que :

$$/ijkl\ldots/ = \begin{cases} 1 & \text{si tous les indices } i,j,k,l,\ldots \text{ sont différents} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{A.58}$$

Pour estimer un moment centré d'ordre quatre multivarié, au maximum quatre éléments du vecteur aléatoire sont concernés. Pour alléger les notations, on peut donc supposer que la taille du vecteur aléatoire vaut $n = 4$. L'algorithme à suivre pour calculer itérativement $\widetilde{\mathbf{B}}$ et $\widetilde{\mathbf{\Xi}}$ est le suivant :

1. Chargement du premier membre $\widetilde{\mathbf{x}}_1^b$.
2. Initialisation des variables : $\boldsymbol{\mu} = \widetilde{\mathbf{x}}_1^b$, toutes les sommes $s_{\mathbf{k},1}$ sont mises à zéro.
3. Pour p de 2 à N :
   — Chargement du membre $\widetilde{\mathbf{x}}_p^b$.
   — Mise à jour de la somme d'ordre quatre, $s_{(1,1,1,1),p}$:

$$\begin{aligned} s_{(1,1,1,1),p} = s_{(1,1,1,1),p-1} &- \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{4}(\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle\widetilde{x}_i^b\rangle_{p-1}) s_{(/1i/,/2i/,/3i/,/4i/),p-1} \\ &+ \frac{1}{p^2}\sum_{1\leq i,j\leq 4}(\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle\widetilde{x}_i^b\rangle_{p-1})(\widetilde{x}_{j,p}^b - \langle\widetilde{x}_j^b\rangle_{p-1}) s_{(/1ij/,/2ij/,/3ij/,/4ij/),p-1} \\ &+ \frac{(p-1)(p^2-3p+3)}{p^3}\prod_{i=1}^{4}(\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle\widetilde{x}_i^b\rangle_{p-1}) \end{aligned} \tag{A.59}$$

   — Mise à jour des sommes d'ordre trois, de la forme $s_{\mathbf{k},p}$ où $\mathbf{k}$ est une permutation du vecteur $(1,1,1,0)$. Par exemple pour $s_{(1,1,1,0),p}$:

$$\begin{aligned} s_{(1,1,1,0),p} = s_{(1,1,1,0),p-1} &- \frac{1}{p}\sum_{i=1}^{3}(\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle\widetilde{x}_i^b\rangle_{p-1}) s_{(/1i/,/2i/,/3i/,0),p-1} \\ &+ \frac{(p-1)(p-2)}{p^2}\prod_{i=1}^{3}(\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle\widetilde{x}_i^b\rangle_{p-1}) \end{aligned} \tag{A.60}$$

   — Mise jour des sommes d'ordre deux, de la forme $s_{\mathbf{k},p}$ où $\mathbf{k}$ est une permutation du vecteur $(1,1,0,0)$. Par exemple pour $s_{(1,1,0,0),p}$:

$$s_{(1,1,0,0),p} = s_{(1,1,0,0),p-1} + \frac{p-1}{p}(\widetilde{x}_{1,p}^b - \langle\widetilde{x}_1^b\rangle_{p-1})(\widetilde{x}_{2,p}^b - \langle\widetilde{x}_2^b\rangle_{p-1}) \tag{A.61}$$

   — Mise à jour des moyennes :

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu} + \frac{1}{p}(\widetilde{\mathbf{x}}_p^b - \boldsymbol{\mu}) \tag{A.62}$$

4. Normalisation des sommes pour obtenir les moments centrés :
   — Covariances :

$$\widetilde{B}_{12} = \frac{1}{N-1} s_{(1,1,0,0),N} \tag{A.63}$$

— Moment centré d'ordre quatre :

$$\widetilde{\Xi}_{1234} = \frac{1}{N} s_{(1,1,1,1),N} \tag{A.64}$$

A.3. Théorie du filtrage linéaire optimal

A.3.1. Changement de base du filtre optimal

La matrice inversible $\mathbf{P}$ permet de passer de la base $\mathcal{B}_{\mathbf{x}}$ à la base $\mathcal{B}_{\mathbf{s}}$:

$$\mathbf{s} = \mathbf{P}\mathbf{x} \tag{A.65a}$$
$$\mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{s} \tag{A.65b}$$

Supposons que les filtres $(\mathbf{F}_{\mathbf{x}}, \mathbf{f}_{\mathbf{x}})$ et $(\mathbf{F}_{\mathbf{s}}, \mathbf{f}_{\mathbf{s}})$ soient optimaux dans les bases $\mathcal{B}_{\mathbf{x}}$ et $\mathcal{B}_{\mathbf{s}}$ respectivement, on obtient des équations 3.37a et 3.37b :

$$\mathbf{F}_{\mathbf{x}} = \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}, \widetilde{\mathbf{x}}\right) \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}\right)^{-1} \tag{A.66a}$$
$$\mathbf{f}_{\mathbf{x}} = \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}\big] - \mathbf{F}_{\mathbf{x}} \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{x}}\big] \tag{A.66b}$$

et :

$$\mathbf{F}_{\mathbf{s}} = \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{s}}^{\star}, \widetilde{\mathbf{s}}\right) \mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{s}}\right)^{-1} \tag{A.67a}$$
$$\mathbf{f}_{\mathbf{s}} = \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{s}}^{\star}\big] - \mathbf{F}_{\mathbf{s}} \mathbb{E}\big[\widetilde{\mathbf{s}}\big] \tag{A.67b}$$

Les covariances dans les deux bases étant liées par la relation :

$$\mathrm{Cov}\left(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2\right) = \mathbf{P}\, \mathrm{Cov}\left(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\right) \mathbf{P}^{\mathrm{T}} \tag{A.68}$$

Les deux filtres sont alors liés par la relation :

$$\mathbf{F}_{\mathbf{s}} = \mathbf{P}\mathbf{F}_{\mathbf{x}}\mathbf{P}^{-1} \tag{A.69a}$$
$$\mathbf{f}_{\mathbf{s}} = \mathbf{P}\mathbf{f}_{\mathbf{x}} \tag{A.69b}$$

A.3.2. Diagonalisation du gain du filtre optimal

Comme $\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}\right)$ et $\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^{e}\right)$ sont des matrices de covariances, elles sont symétriques définies positives et sont donc diagonalisables dans une base orthornormale :

$$\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}\right) = \mathbf{P}^{\mathrm{T}}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}} \mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}} \mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}} \tag{A.70a}$$
$$\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}} \mathbf{P}^{\mathrm{T}}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}} = \mathbf{I} \tag{A.70b}$$

et :

$$\mathrm{Cov}\left(\widetilde{\mathbf{x}}^{e}\right) = \mathbf{P}^{\mathrm{T}}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{e}} \mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{e}} \mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{e}} \tag{A.71a}$$
$$\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{e}} \mathbf{P}^{\mathrm{T}}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{e}} = \mathbf{I} \tag{A.71b}$$

où $\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}}$ et $\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{e}}$ sont des matrices diagonales dont les coefficients diagonaux sont strictement positifs. On peut donc définir $\mathbf{D}^{-1/2}_{\widetilde{\mathbf{x}}^{\star}}$, la matrice diagonale dont les coefficients diagonaux sont

les inverses des racines carrées de ceux de $\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}$, ce qui donne

$$\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{-1/2}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}\,\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^\star)\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{-1/2} = \mathbf{I} \tag{A.72}$$

On définit alors :

$$\mathbf{C} = \mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{-1/2}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}\,\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{-1/2} \tag{A.73}$$

Sachant que si deux matrices $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$ sont symétrique définies positives, le produit $\mathbf{ABA}$ l'est aussi, on en déduit que le produit

$$\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{C}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star} = \mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{-1/2}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}\,\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{-1/2}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star} \tag{A.74}$$

est symétrique défini positif, car $\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)$ et $\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{-1/2}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}$ le sont aussi.

Le changement de base $\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}$ étant orthonormal, la matrice $\mathbf{C}$ est elle aussi symétrique définie positive, donc diagonalisable dans une base orthonormale :

$$\mathbf{C} = \mathbf{P}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\mathbf{C}}\mathbf{P}_{\mathbf{C}} \tag{A.75a}$$

$$\mathbf{P}_{\mathbf{C}}\mathbf{P}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}} = \mathbf{I} \tag{A.75b}$$

où $\mathbf{D}_{\mathbf{C}}$ est une matrice diagonale à coefficients diagonaux strictement positifs.

Finalement, on pose $\mathbf{P} = \mathbf{P}_{\mathbf{C}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{-1/2}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}$ pour obtenir :

$$\begin{aligned}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{P}^{-\mathrm{T}} &= \mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{1/2}\mathbf{P}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}}\mathbf{P}_{\mathbf{C}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{1/2}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}\\ &= \mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}\\ &= \mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^\star)\end{aligned} \tag{A.76}$$

et :

$$\begin{aligned}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{D}_{\mathbf{C}}\mathbf{P}^{-\mathrm{T}} &= \mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{1/2}\mathbf{P}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\mathbf{C}}\mathbf{P}_{\mathbf{C}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{1/2}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}\\ &= \mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{\mathrm{T}}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{1/2}\mathbf{C}\mathbf{D}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}^{1/2}\mathbf{P}_{\widetilde{\mathbf{x}}^\star}\\ &= \mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)\end{aligned} \tag{A.77}$$

Le gain du filtre $\mathbf{F}$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned}\mathbf{F} &= \mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^\star)\big(\,\mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^\star) + \mathrm{Cov}\,(\widetilde{\mathbf{x}}^e)\big)^{-1}\\ &= \mathbf{P}^{-1}\mathbf{P}^{-\mathrm{T}}\big(\mathbf{P}^{-1}(\mathbf{I}+\mathbf{D}_{\mathbf{C}})\mathbf{P}^{-\mathrm{T}}\big)^{-1}\\ &= \mathbf{P}^{-1}(\mathbf{I}+\mathbf{D}_{\mathbf{C}})^{-1}\mathbf{P}\end{aligned} \tag{A.78}$$

Ainsi, le gain du filtre est toujours diagonalisable avec les hypothèses faites sur l'erreur d'estimation. De plus, ses valeurs propres sont de la forme $1/(1+\lambda_i)$, où λ_i est un coefficient diagonal de $\mathbf{D}_{\mathbf{C}}$, c'est-à-dire une valeur propre de $\mathbf{C}$, strictement positive. Les valeurs propres du gain du filtre optimal sont donc toujours strictement comprises entre 0 et 1.

A.4. Filtrage linéaire optimal des covariances

A.4.1. Moments centrés aléatoires

Soit $\mathbf{x}$ un vecteur aléatoire, dont les moments sont connus jusqu'à l'ordre deux. Son espérance et sa covariance sont respectivement données par :

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}] = \mathbf{a} \tag{A.79a}$$
$$\mathrm{Cov}\,(\mathbf{x}) = \mathbf{A} \tag{A.79b}$$

Soit $\mathbf{A}^{1/2}$ une racine carrée de $\mathbf{A}$, qui permet d'exprimer $\mathbf{x}$ et toute généralité sous la forme :

$$\mathbf{x} = \mathbf{a} + \mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\zeta} \tag{A.80}$$

où $\boldsymbol{\zeta}$ est un vecteur aléatoire sans biais dont la matrice de covariance est l'identité :

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\zeta}] = 0 \tag{A.81a}$$
$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\zeta}\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{T}}] = \mathbf{I} \tag{A.81b}$$

Les moments d'ordre supérieur de $\boldsymbol{\zeta}$ sont déterminés par ceux de $\mathbf{x}$ et par $\mathbf{A}$.

Supposons maintenant que $\mathbf{a}$ et $\mathbf{A}$ soient aussi des variables aléatoires non nécessairement indépendantes, mais indépendantes de $\boldsymbol{\zeta}$:

$$\mathbf{a} \perp\!\!\!\perp \boldsymbol{\zeta} \tag{A.82a}$$
$$\mathbf{A} \perp\!\!\!\perp \boldsymbol{\zeta} \tag{A.82b}$$

Ces hypothèses permettent de vérifier que :

$$\mathbb{E}[\mathbf{x}] = \mathbb{E}[\mathbf{a}] + \mathbb{E}[\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\zeta}] = \mathbb{E}[\mathbf{a}] \tag{A.83}$$

et que :

$$\begin{aligned}
\mathrm{Cov}\,(\mathbf{x}) &= \mathbb{E}\big[(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])(\mathbf{x} - \mathbb{E}[\mathbf{x}])^{\mathrm{T}}\big] \\
&= \mathbb{E}\big[(\mathbf{a} + \mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\zeta} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])(\mathbf{a} + \mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\zeta} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])^{\mathrm{T}}\big] \\
&= \mathbb{E}\big[(\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])(\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])^{\mathrm{T}}\big] + \mathbb{E}\big[(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\zeta})(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\zeta})^{\mathrm{T}}\big] \\
&\quad + \mathbb{E}\big[(\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\zeta})^{\mathrm{T}}\big] + \mathbb{E}\big[(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\zeta})(\mathbf{a} - \mathbb{E}[\mathbf{a}])^{\mathrm{T}}\big] \\
&= \mathrm{Cov}(\mathbf{a}) + \mathbb{E}[\mathbf{A}]
\end{aligned} \tag{A.84}$$

En résumé, lorsque l'espérance et la covariance d'un vecteur aléatoire deviennent elles aussi des variables aléatoires sous les hypothèses précédentes :

— la nouvelle espérance $\mathbb{E}[\mathbf{x}]$ est donnée par l'espérance de l'espérance initiale $\mathbf{a}$ (équation A.83),
— la nouvelle covariance $\mathrm{Cov}\,(\mathbf{x})$ est donnée par la covariance de l'espérance initiale $\mathbf{a}$ ajoutée à l'espérance de la covariance initiale $\mathbf{A}$ (équation A.84).

A.4.2. Critères de filtrage linéaire optimal des covariances

Les conditions d'optimalité du filtrage linéaire 3.36a et 3.36b transposées aux covariances sont données par :

$$\mathbb{E}[\widehat{B}^e_{ij}] = 0 \tag{A.85}$$

$$\mathbb{E}[\widehat{B}^e_{ij}\widetilde{B}_{kl}] = 0 \tag{A.86}$$

Dans cette section, on suppose que les hypothèses 3.40, 3.41 et 3.66 sont vérifiées.

Propriété directe

L'erreur d'estimation de la covariance brute $\widetilde{\mathbf{B}}^e$ peut être exprimée comme :

$$\begin{aligned}\widetilde{B}^e_{ij} &= \widetilde{B}_{ij} - \widetilde{B}^\star_{ij} \\ &= \widetilde{B}_{ij} - \widehat{B}_{ij} + \widehat{B}^e_{ij}\end{aligned} \tag{A.87}$$

A l'optimalité du filtre, les propriétés d'orthogonalité de l'erreur de filtrage et de l'estimation brute (équation 3.48) font disparaître plusieurs termes de la covariance de $\widetilde{\mathbf{B}}^e$, pour donner :

$$\mathbb{E}[\widetilde{B}^e_{ij}\widetilde{B}^e_{kl}] = \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widetilde{B}_{kl}] + \mathbb{E}[\widehat{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] + \mathbb{E}[\widehat{B}^e_{ij}\widehat{B}^e_{kl}] - 2\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] \tag{A.88}$$

En combinant cette équation avec les équations 3.50 et 3.51, on obtient :

$$\mathbb{E}[\widetilde{B}^e_{ij}\widetilde{B}^e_{kl}] = \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widetilde{B}_{kl}] - \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] \tag{A.89}$$

Pour obtenir le résultat qui nous intéresse, on part de l'équation 3.69 dans laquelle on remplace :

- le membre de gauche Cov $(\widetilde{B}^e_{ij}, \widetilde{B}^e_{kl})$ grâce à l'équation A.89.
- l'espérance du moment centré d'ordre quatre asymptotique grâce à l'équation 3.72,
- tous les produits d'éléments de la covariance asymptotique par l'équation 3.51,

On obtient ainsi :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widetilde{B}_{kl}] - \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] = \frac{1}{N}\Bigg(&\frac{N^3}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijkl}] \\ &- \frac{(2N-3)}{N^2-3N+3}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ik}\widehat{B}_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}_{il}\widehat{B}_{jk}]\Big)\Bigg) \\ &- \frac{1}{N}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] + \frac{1}{N(N-1)}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ik}\widehat{B}_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}_{il}\widehat{B}_{jk}]\Big)\end{aligned} \tag{A.90}$$

ce qui est équivalent à :

$$\begin{aligned}&\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widetilde{B}_{kl}] - \frac{(N-2)^2}{N^2-3N+3}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] - \frac{N^2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijkl}] \\ &+ \frac{N-2}{(N-1)(N^2-3N+3)}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ik}\widehat{B}_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}_{il}\widehat{B}_{jk}]\Big) = 0\end{aligned} \tag{A.91}$$

Propriété inverse

Pour démontrer la propriété inverse, on suppose que l'équation A.91 est vérifiée, et on montre qu'alors le filtre linéaire est nécessairement optimal. Les hypothèses 3.40 et 3.41 impliquent que :

$$\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widetilde{B}_{kl}] = \mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}^{e}_{ij}\widetilde{B}^{e}_{kl}] \tag{A.92}$$

et aussi que :

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{kl}] &= \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}^{e}_{kl}] \\ &= \mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}_{ij}\widetilde{B}^{\star}_{kl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}^{e}_{kl}]\end{aligned} \tag{A.93}$$

En combinant cette équation et les équations 3.68 et 3.72 avec l'équation A.91, on obtient :

$$0 = (N-2)\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}^{e}_{kl}] - \frac{1}{N-1}\Big(\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ik}\widehat{B}^{e}_{jl}] + \mathbb{E}[\widetilde{B}_{il}\widehat{B}^{e}_{jk}]\Big) \tag{A.94}$$

L'équation A.94 peut être écrite pour les $4! = 24$ permutations d'indices (i, j, k, l), ce qui construit un système linéaire de 24 équations à 24 inconnues : les couples $\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}^{e}_{kl}]$ et leurs permutations d'indices. Le déterminant de ce système peut être calculé explicitement à l'aide d'un logiciel de calcul formel : il s'agit d'une fraction de deux polynômes en N de degrés 36 et 12. Ce déterminant ne s'annule que pour $N \in \{0, 2, 3\}$. Si l'ensemble compte plus de trois membres, alors le système linéaire est inversible, d'où :

$$\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}^{e}_{kl}] = 0 \tag{A.95}$$

et de même pour toutes les permutations d'indices.

Cas du filtrage de Schur

Le filtre de Schur optimal est obtenu lorsque l'erreur de filtrage est orthogonale à l'estimation brute (équation 3.60) soit pour les covariances :

$$\mathbb{E}[\widehat{B}^{e}_{ij}\widetilde{B}_{ij}] = 0 \tag{A.96}$$

Mais contrairement au filtre linéaire, l'erreur de filtrage est biaisée.

Il existe une analogie évidente entre les propriétés du filtre linéaire optimal et celles du filtre de Schur optimal :

- orthogonalité de l'erreur de filtrage et de l'estimation brute : équations 3.48 et 3.64a
- espérance de l'erreur de filtrage au carré : équations 3.50 et 3.64b
- transformation du produit d'éléments de la vérité : équations 3.51 et 3.64c

La seule différence est que ces propriétés du filtrage de Schur ne concernent que les produits élément par élément, et pas les produits croisés comme pour le filtrage linéaire.

Il est donc possible d'appliquer la même démonstration que dans le paragraphe précédent, en remplaçant les termes de l'équation 3.69 pour laquelle on pose $k = i$ et $l = j$. Seul le produit $\mathbb{E}[\widetilde{B}^{\star}_{ii}\widetilde{B}^{\star}_{jj}]$ ne peut pas être transformé par l'équation 3.64c, car l'orthogonalité de l'équation 3.60 ne s'applique pas aux produits croisés.

Ainsi, le critère d'optimalité du filtrage de Schur est donné par :

$$\mathcal{C}_{ij}^{S} = 0 \tag{A.97}$$

avec :

$$\begin{aligned}\mathcal{C}_{ij}^{S} = \mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}^{2}] - \frac{N^3 - 5N^2 + 7N - 2}{(N-1)(N^2 - 3N + 3)}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ij}\widehat{B}_{ij}] - \frac{N^2}{(N-1)(N^2 - 3N + 3)}\mathbb{E}[\widetilde{\Xi}_{ijij}] \\ + \frac{N-2}{(N-1)(N^2 - 3N + 3)}\mathbb{E}[\widetilde{B}_{ii}^{\star}\widetilde{B}_{jj}^{\star}]\end{aligned} \tag{A.98}$$

A.4.3. Unicité des critères de filtrage des variances

Propriétés dans l'espace spectral

Les variances brutes et filtrées $\widetilde{\mathbf{v}}$ et $\widehat{\mathbf{v}}$ peuvent être transformées dans l'espace spectral pour donner $\widetilde{\mathbf{s}}$ et $\widehat{\mathbf{s}}$. La formule de Plancherel donne la moyenne spatiale d'un produit de Schur de deux vecteurs dans l'espace physique comme une moyenne spectrale d'un produit de Schur de leurs équivalents dans l'espace spectral :

$$\mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}} \circ \widehat{\mathbf{v}}) = \sum_{k=0}^{K} \widetilde{s}_{k}\overline{\widehat{s}_{k}} \tag{A.99}$$

où K est l'indice du nombre d'onde maximum, et la barre supérieure indique le complexe conjugué. Les résultats de Berre (2000) montre qu'un filtrage homogène et isotrope dans l'espace physique est équivalent à un filtre diagonal dans l'espace spectral :

$$\widehat{s}_{k} = \rho_{k}\widetilde{s}_{k} \tag{A.100}$$

où les ρ_{k} sont les coefficients réels du filtre spectral, bornés entre 0 et 1, avec $\rho_{0} = 1$ pour conserver la moyenne spatiale. Pour les formes usuelles des fonctions de filtrage, on peut vérifier que pour $k > 0$:

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{k}}{\mathrm{d}\mathcal{L}^{f}} < 0 \tag{A.101}$$

car pour une intensité de filtrage croissante (si $\mathcal{L}^{f}$ augmente), les coefficients ρ_{k} convergent vers 0.

Démonstration de l'unicité

Dans le cas général, la transformée spectrale de $\widetilde{\boldsymbol{\xi}}$ est notée $\widetilde{\boldsymbol{\zeta}}$. L'équation 4.8 peut ainsi être exprimée dans l'espace spectral par :

$$\bar{\mathfrak{C}} = \sum_{k=0}^{K}\left(1 - \frac{N(N-3)(N-2)}{(N-1)(N^2 - 3N + 3)}\rho_{k}\right)|\widetilde{s}_{k}|^{2} - \frac{N^2}{(N-1)(N^2 - 3N + 3)}\widetilde{\zeta}_{0} \tag{A.102}$$

Sa dérivée par rapport à un coefficient ρ_{k} est donnée pour $k > 0$ par :

$$\frac{\partial\bar{\mathfrak{C}}}{\partial\rho_{k}} = -\frac{N(N-3)(N-2)}{(N-1)(N^2 - 3N + 3)}|\widetilde{s}_{k}|^{2} < 0 \tag{A.103}$$

de telle sorte que :

$$\frac{\mathrm{d}\bar{\mathfrak{C}}}{\mathrm{d}\mathcal{L}^f} = \sum_{k=1}^{K} \frac{\partial \bar{\mathfrak{C}}}{\partial \rho_k} \frac{\mathrm{d}\rho_k}{\mathrm{d}\mathcal{L}^f} > 0 \tag{A.104}$$

ce qui prouve que $\bar{\mathfrak{C}}(\mathcal{L}^f)$ est une fonction strictement croissante.

De plus, s'il n'y a pas de filtrage ($\mathcal{L}^f = 0$), $\widehat{\mathbf{v}} = \widetilde{\mathbf{v}}$ de telle sorte que :

$$\bar{\mathfrak{C}}(\mathcal{L}^f = 0) = \frac{N^2 - 3}{(N-1)(N^2 - 3N + 3)} \mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}}^2) - \frac{N^2}{(N-1)(N^2 - 3N + 3)} \mu^{\mathrm{S}}\Big(\widetilde{\boldsymbol{\xi}}\Big) \tag{A.105}$$

D'après les équations 3.5a et 3.5b utilisées pour calculer $\widetilde{\mathbf{v}}$ et $\widetilde{\boldsymbol{\xi}}$ respectivement, on obtient :

$$(N-1)\widetilde{v}_i = \sum_{p=1}^{N} \left(\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle \widetilde{x}_i^b \rangle\right)^2 \tag{A.106}$$

$$N\widetilde{\xi}_i = \sum_{p=1}^{N} \left(\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle \widetilde{x}_i^b \rangle\right)^4 \tag{A.107}$$

et d'après la propriété de convexité :

$$\sum_{p=1}^{N} \left(\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle \widetilde{x}_i^b \rangle\right)^4 \geq \Big(\sum_{p=1}^{N} \left(\widetilde{x}_{i,p}^b - \langle \widetilde{x}_i^b \rangle\right)^2 \Big)^2 \tag{A.108}$$

d'où :

$$\widetilde{\xi}_i \geq \frac{(N-1)^2}{N} \widetilde{v}_i^2 \tag{A.109}$$

et donc finalement :

$$\mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\boldsymbol{\xi}}) \geq \frac{(N-1)^2}{N} \mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}}^2) \tag{A.110}$$

et :

$$\bar{\mathfrak{C}}(\mathcal{L}^f = 0) \leq -\frac{N^3 - 3N^2 + N + 3}{(N-1)(N^2 - 3N + 3)} \mu^{\mathrm{S}}(\widetilde{\mathbf{v}}^2) < 0 \tag{A.111}$$

En conclusion, la condition d'optimalité $\bar{\mathfrak{C}}(\mathcal{L}^f) = 0$ n'est obtenue que pour une unique valeur de longueur de filtrage $\mathcal{L}^f$.

A.5. Longueur de portée d'une fonction hypergaussienne

D'après Purser *et al.* (2003b), la famille des fonctions hypergaussiennes peut être définie en 1D par :

$$H_{\ell,\gamma}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\left(s - \log(\ell)\right)^2}{\gamma} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}\exp(s)} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{\exp(s)} \right)^2 \right) \mathrm{d}s \tag{A.112}$$

où ℓ est un paramètre d'échelle, γ un paramètre de forme et s est une variable d'intégration. $H_{\ell,\gamma}(0)$ est donc donné par :

$$H_{\ell,\gamma}(0) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2\gamma}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\left(s - \log(\ell)\right)^2}{\gamma} - s \right) \mathrm{d}s \tag{A.113}$$

et la dérivée d'ordre deux à l'origine par est donnée par :

$$\left.\frac{\mathrm{d}^2 H_{\ell,\gamma}}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=0} = -\frac{1}{\sqrt{(2\pi)^2\gamma}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{\left(s-\log(\ell)\right)^2}{\gamma} - 3s\right)\mathrm{d}s \tag{A.114}$$

Sachant que pour tout réel positif a :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\Big(-\left(as^2+bs+c\right)\Big)\mathrm{d}s = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\exp\left(\frac{b^2}{4a}-c\right) \tag{A.115}$$

le rapport des équations A.113 et A.114 peut être simplifié en :

$$\frac{H_{\ell,\gamma}(0)}{\left.\frac{\mathrm{d}^2 H_{\ell,\gamma}}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=0}} = -\exp\left(\frac{\gamma}{2}\left(\left(1-\frac{\log(\ell)}{\gamma}\right)^2 - \left(3-\frac{\log(\ell)}{\gamma}\right)\right)^2\right) = -\exp\left(2\log(\ell)-4\gamma\right) \tag{A.116}$$

de sorte que la longueur de portée définie dans Daley (1991) est donnée par :

$$\mathcal{L} = \sqrt{-\frac{H_{\ell,\gamma}(0)}{\left.\frac{\mathrm{d}^2 H_{\ell,\gamma}}{\mathrm{d}x^2}\right|_{x=0}}} = \frac{\ell}{\exp(2\gamma)} \tag{A.117}$$

A.6. Propriétés de l'inflation estimée

On étudie les propriétés de l'inflation estimée par l'équation 6.10 :

$$\bar{\lambda} = \frac{\mathrm{Tr}\left(\mathbb{E}\left[\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\right]\right)}{\mathrm{Tr}\left(\widetilde{\mathbf{B}}\right)} \tag{A.118}$$

En notant $\mathbf{x}^b$ l'ébauche du cycle d'assimilation non perturbé, la différence $\boldsymbol{\varepsilon}$ peut être décomposée en :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \widetilde{\mathbf{b}} - \delta\mathbf{x}^a \tag{A.119}$$

où $\widetilde{\mathbf{b}}$ est la différence entre la moyenne de l'ensemble et l'ébauche non perturbée :

$$\widetilde{\mathbf{b}} = \langle \widetilde{\mathbf{x}}^b \rangle - \mathbf{x}^b \tag{A.120}$$

et $\delta\mathbf{x}^a$ est l'incrément d'analyse du cycle d'assimilation non perturbé :

$$\delta\mathbf{x}^a = \mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b \tag{A.121}$$

Si l'ensemble est sans biais ($\mathbb{E}[\widetilde{\mathbf{b}}] = 0$), alors Muirhead (2005) montre que :

$$\mathbb{E}\left[\widetilde{\mathbf{b}}\widetilde{\mathbf{b}}^{\mathrm{T}}\right] \simeq \widetilde{\mathbf{B}}^{\star}/N \tag{A.122}$$

L'incrément d'analyse est donné par :

$$\delta\mathbf{x}^a = \overline{\mathbf{B}}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\left(\mathbf{H}\overline{\mathbf{B}}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \overline{\mathbf{R}}\right)^{-1}\mathbf{d} \tag{A.123}$$

où $\mathbf{d}$ est l'innovation. Ainsi :

$$\mathbb{E}\big[\delta\mathbf{x}^a\delta\mathbf{x}^{a\mathrm{T}}\big] = \overline{\mathbf{B}}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\big(\mathbf{H}\overline{\mathbf{B}}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \overline{\mathbf{R}}\big)^{-1}\mathbb{E}\big[\mathbf{d}\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\big]\big(\mathbf{H}\overline{\mathbf{B}}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \overline{\mathbf{R}}\big)^{-\mathrm{T}}\mathbf{H}\overline{\mathbf{B}} \tag{A.124}$$

avec :

$$\mathbb{E}\big[\mathbf{d}\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\big] = \mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R} \tag{A.125}$$

En supposant que $\overline{\mathbf{B}} \simeq \mathbf{B}$ et que $\overline{\mathbf{R}} \simeq \mathbf{R}$, alors :

$$\mathbb{E}\big[\delta\mathbf{x}^a\delta\mathbf{x}^{a\mathrm{T}}\big] \simeq \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\big(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R}\big)^{-1}\mathbf{H}\mathbf{B} \tag{A.126}$$

En supposant que $\widetilde{\mathbf{b}}$ et $\delta\mathbf{x}^a$ sont décorrélés, on obtient :

$$\mathbb{E}\big[\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\big] \simeq \frac{1}{N}\widetilde{\mathbf{B}}^{\star} + \mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\big(\mathbf{H}\mathbf{B}\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + \mathbf{R}\big)^{-1}\mathbf{H}\mathbf{B} \tag{A.127}$$

Dans un cas idéalisé où le vecteur d'état ne compte qu'un seul élément qui est observé directement, l'inflation estimée vaut :

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{N}\frac{\widetilde{v}^{\star}}{\widetilde{v}} + \frac{v^2}{\widetilde{v}(v + (\sigma^o)^2)} \tag{A.128}$$

où la lettre v renvoie aux variances d'erreur d'ébauche et σ^o est l'écart-type d'erreur d'observation. Dans la limite asymptotique où $N \to \infty$ et dans l'hypothèse où $(\sigma^o)^2 \ll v$, alors :

$$\bar{\lambda} \to \frac{v}{\widetilde{v}^{\star}} \tag{A.129}$$

ce qui est la valeur théorique de λ pour un ensemble de taille infinie.

Cependant, si l'ensemble est de taille finie et si $(\sigma^o)^2$ n'est pas négligeable devant v, alors la valeur de l'inflation estimée par l'équation A.128 peut être considérée sous la forme :

$$\bar{\lambda} = a + b\lambda \tag{A.130}$$

où $\lambda = v/\widetilde{v}$ est l'inflation théorique, et où :

— le terme additif $a = \widetilde{v}^{\star}/(N\widetilde{v})$, d'espérance $1/N$, tend à surestimer l'inflation,

— le facteur $b = v/(v + (\sigma^o)^2)$, toujours inférieur à 1, tend à sous-estimer l'inflation.

Ces deux effets peuvent donc se compenser dans une certaine mesure, mais rien ne le garantit. En particulier, on ne peut garantir que l'inflation ainsi calculée soit supérieure à 1, ce qui est requis si l'on entend pallier l'absence d'erreur modèle additive.

Bibliographie

Aitken AC. 1935. On least squares and linear combinations of observations. In : *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, vol. 55. pp. 42–48.

Amodei M, Stein J. 2009. Deterministic and fuzzy verification methods for a hierarchy of numerical models. *Meteorological Applications* **16**(2) : 191–203.

Anderson JL. 2007. Exploring the need for localization in ensemble data assimilation using a hierarchical ensemble filter. *Physica D : Nonlinear Phenomena* **230**(1-2) : 99–111.

Anderson JL. 2012. Localization and sampling error correction in ensemble Kalman filter data assimilation. *Monthly Weather Review* **140**(7) : 2359–2371.

Anderson JL, Lei L. 2013. Empirical localization of observation impact in ensemble Kalman filters. *Monthly Weather Review* **141**(11) : 4140–4153.

Andersson E, Bauer P, Beljaars A, Chevallier F, Hólm E, Janisková M, Kållberg P, Kelly G, Lopez P, Mcnally A, Moreau E, Simmons AJ, Thépaut JN, Tompkins AM. 2005. Assimilation and modeling of the atmospheric hydrological cycle in the ecmwf forecasting system. *Bulletin of the American Meteorological Society* **86**(3).

Auligné T. 2012. An integrated ensemble/variational hybrid data assimilation system. Présentation à l'International Conference on Ensemble Methods in Geophysical Sciences, du 12 au 16 novembre 2012, Toulouse, France.

Bannister RN. 2008a. A review of forecast error covariance statistics in atmospheric variational data assimilation. I : Characteristics and measurements of forecast error covariances. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **134**(637) : 1951–1970.

Bannister RN. 2008b. A review of forecast error covariance statistics in atmospheric variational data assimilation. II : Modelling the forecast error covariance statistics. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **134**(637) : 1971–1996.

Barker DM, Huang W, Guo YR, Bourgeois AJ, Xiao QN. 2004. A three-dimensional variational data assimilation system for MM5 : Implementation and initial results. *Monthly Weather Review* **132**(4) : 897–914.

Bartello P, Mitchell HL. 1992. A continuous three-dimensional model of short-range forecast error covariances. *Tellus A* **44**(3) : 217–235.

Belo Pereira M, Berre L. 2006. The use of an ensemble approach to study the background error covariances in a global NWP model. *Monthly Weather Review* **134**(9) : 2466–2489.

Berre L. 2000. Estimation of synoptic and mesoscale forecast error covariances in a limited-area model. *Monthly Weather Review* **128**(3) : 644–667.

Berre L, Desroziers G. 2010. Filtering of background error variances and correlations by local spatial averaging : A review. *Monthly Weather Review* **138**(10) : 3693–3720.

Berre L, Pannekoucke O, Desroziers G, Stefanescu S, Chapnik B, Raynaud L. 2007. A variational assimilation ensemble and the spatial filtering of its error covariances : increase of sample size by local spatial averaging. In : *ECMWF Workshop on Flow-dependent aspecyts of data assimilation, 11-13 June 2007*. ECMWF, pp. 151–168.

Berre L, Stefanescu S, Belo Pereira M. 2006. The representation of the analysis effect in three error simulation techniques. *Tellus A* **58**(2) : 196–209.

Bishop CH, Hodyss D. 2007. Flow-adaptive moderation of spurious ensemble correlations and its use in ensemble-based data assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **133**(629) : 2029–2044.

Bishop CH, Hodyss D. 2009a. Ensemble covariances adaptively localized with ECO-RAP. part 1 : tests on simple error models. *Tellus A* **61**(1) : 84–96.

Bishop CH, Hodyss D. 2009b. Ensemble covariances adaptively localized with ECO-RAP. part 2 : a strategy for the atmosphere. *Tellus A* **61**(1) : 97–111.

Bishop CH, Hodyss D. 2011. Adaptive ensemble covariance localization in ensemble 4D-VAR state estimation. *Monthly Weather Review* **139**(4) : 1241–1255.

Bishop CH, Satterfield EA. 2012. Hidden error variance theory 1 : Exposition and analytic model. *Monthly Weather Review* **141** : 1454–1468.

Bocquet M. 2011. Ensemble kalman filtering without the intrinsic need for inflation. *Nonlinear Processes in Geophysics* **18**(5) : 735–750.

Bocquet M, Sakov P. 2012. Combining inflation-free and iterative ensemble kalman filters for strongly nonlinear systems. *Nonlinear Processes in Geophysics* **19**(3) : 383–399.

Bonavita M, Isaksen L, Holm E. 2012. On the use of EDA background error variances in the ECMWF 4D-Var. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **138** : 1540–1559.

Bonavita M, Raynaud L, Isaksen L. 2011. Estimating background-error variances with the ecmwf ensemble of data assimilations system : some effects of ensemble size and day-to-day variability. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **137**(655) : 423–434.

Bouttier F. 1994. A dynamical estimation of forecast error covariances in an assimilation system. *Monthly Weather Review* **122**(10) : 2376–2390.

Brousseau P, Berre L, Bouttier F, Desroziers G. 2011. Background-error covariances for a convective-scale data-assimilation system : AROME-France 3D-Var. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **137**(655) : 409–422.

Brousseau P, Berre L, Bouttier F, Desroziers G. 2012. Flow-dependent background-error covariances for a convective-scale data assimilation system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **138**(663) : 310–322.

Brousseau P, Desroziers G, Bouttier F, Chapnik B. 2014. A posteriori diagnostics of the impact of observations on the AROME-France convective-scale data assimilation system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **140**(680) : 982–994.

Buehner M. 2005. Ensemble-derived stationary and flow-dependent background-error covariances : Evaluation in a quasi-operational NWP setting. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **131**(607) : 1013–1043.

Clayton AM, Lorenc AC, Barker DM. 2012. Operational implementation of a hybrid ensemble/4D-Var global data assimilation system at the Met Office. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **139** : 1445–1461.

Courtier P. 1997. Dual formulation of four-dimensional variational assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **123**(544) : 2449–2461.

Courtier P, Freydier C, Geleyn JF, Rabier F, Rochas M. 1991. The arpege project at meteo france. In : *Seminar on Numerical Methods in Atmospheric Models, 9-13 September 1991.* European Centre for Medium-Range Weather Forecasts, pp. 193–232.

Courtier P, Geleyn JF. 1988. A global numerical weather prediction model with variable resolution : Application to the shallow-water equations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **114**(483) : 1321–1346.

Courtier P, Thépaut JN, Hollingsworth A. 1994. A strategy for operational implementation of 4D-Var, using an incremental approach. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **120**(519) : 1367–1387.

Daley R. 1991. *Atmospheric data analysis*. Cambridge University Press.

Davies HC. 1976. A laterul boundary formulation for multi-level prediction models. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **102**(432) : 405–418.

Deckmyn A, Berre L. 2005. A wavelet approach to representing background error covariances in a limited-area model. *Monthly Weather Review* **133**(5) : 1279–1294.

Dee DP. 1995. On-line estimation of error covariance parameters for atmospheric data assimilation. *Monthly Weather Review* **123**(4) : 1128–1145.

Dee DP, da Silva AM. 2003. The choice of variable for atmospheric moisture analysis. *Monthly Weather Review* **131**(1) : 155–171.

Deheuvels P. 1982. *La probabilité, le hasard et la certitude*. Que sais-je ?, Presses Universitaires de France.

Derber J, Bouttier F. 1999. A reformulation of the background error covariance in the ECMWF global data assimilation system. *Tellus A* **51**(2) : 195–221.

Desroziers G, Berre L, Chapnik B, Poli P. 2005. Diagnosis of observation, background and analysis-error statistics in observation space. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **131**(613) : 3385–3396.

Desroziers G, Camino JT, Berre L. 2014. 4denvar : link with 4d state formulation of variational assimilation and different possible implementations. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* doi :10.1002/qj.2325.

Drobinski P, Ducrocq V, Alpert P, Anagnostou E, Béranger K, Borga M, Braud I, Chanzy A, Davolio S, Delrieu G, Estournel C, Boubrahmi NF, Font J, Grubisic V, Gualdi S, Homar V, Ivancan-Picek B, Kottmeier C, Kotroni V, Lagouvardos K, Lionello P, Llasat M, Ludwig W, Lutoff C, Mariotti A, Richard E, Romero R, Rotunno R, Roussot O, Ruin I, Somot S, Taupier-Letage I, Tintore J, Uijlenhoet R, Wernli H. 2013. Hymex, a 10-year multidisciplinary program on the mediterranean water cycle. *Bulletin of the American Meteorological Society* doi :10.1175/BAMS-D-12-00242.1.

Ducrocq V, Braud I, Davolio S, Ferretti R, Flamant C, Jansa A, Kalthoff N, Richard E, Taupier-Letage I, Ayral PA, Belamari S, Berne A, Borga M, Boudevillain B, Bock O, Boichard JL, Bouin MN, Bousquet O, Bouvier C, Chiggiato J, Cimini D, Corsmeier U, Coppola L, Cocquerez P, Defer E, Delanoë J, Di Girolamo P, Doerenbecher A, Drobinski P, Dufournet Y, Fourrié N, Gourley JJ, Labatut L, Lambert D, Le Coz J, Marzano FS, Molinié G, Montani A, Nord G, Nuret M, Ramage K, Rison B, Roussot O, Said F, Schwarzenboeck A, Testor P, Van Baelen J, Vincendon B, Aran M, Tamayo J. 2013. Hymex-sop1, the field campaign dedicated to heavy precipitation and flash flooding in the northwestern mediterranean. *Bulletin of the American Meteorological Society* doi :10.1175/BAMS-D-12-00244.1.

Dykstra R. 1970. Establishing the positive definiteness of the sample covariance matrix. *The Annals of Mathematical Statistics* **41** : 2153–2154.

Evensen G. 1994. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte-Carlo methods to forecast error statistics. *Journal of Geophysical Research* **99**(C5) : 10 143–10 162.

Evensen G. 2003. The ensemble Kalman filter : theoretical formulation and practical implementation. *Ocean Dynamics* **53** : 343–367.

Fisher M, Courtier P. 1995. Estimating the covariance matrices of analysis and forecast error in variational data assimilation. Rapport technique, ECMWF.

Fisher M, Hòlm E, Tan D, Thépaut JN, Trémolet Y. 2009. Balance in the ECMWF analysis. Rapport technique, ECMWF.

Gaspari G, Cohn SE. 1999. Construction of correlation functions in two and three dimensions. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **125**(554) : 723–757.

Gelb A. 1974. *Applied optimal estimation*. The MIT press.

Guidard V. 2007. Assimilation multi-échelle dans un modèle météorologique régional. Thèse de doctorat, Université Toulouse III - Paul Sabatier.

Guidard V, Fourrié N, Brousseau P, Rabier F. 2011. Impact of iasi assimilation at global and

convective scales and challenges for the assimilation of cloudy scenes. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **137**(661) : 1975–1987.

Hamill TM, Snyder C. 2000. A hybrid ensemble kalman filter/3D variational analysis scheme. *Monthly Weather Review* **128**(8) : 2905–2919.

Hamill TM, Whitaker JS, Snyder C. 2001. Distance-dependent filtering of background error covariance estimates in an ensemble Kalman filter. *Monthly Weather Review* **129**(11) : 2776–2790.

Haugen JE, Machenhauer B. 1993. A spectral limited-area model formulation with time-dependent boundary conditions applied to the shallow-water equations. *Monthly Weather Review* **121**(9) : 2618–2630.

Hólm E, Andersson E, Beljaars A, Lopez P, Mahfouf J, Simmons A, Thépaut J. 2002. *Assimilation and modelling of the hydrological cycle : Ecmwf's status and plans*. ECMWF.

Houtekamer PL, Mitchell HL. 1998. Data assimilation using an ensemble Kalman filter technique. *Monthly Weather Review* **126**(3) : 796–811.

Houtekamer PL, Mitchell HL. 2001. A sequential ensemble Kalman filter for atmospheric data assimilation. *Monthly Weather Review* **129**(1) : 123–137.

Houtekamer PL, Mitchell HL, Deng X. 2009. Model error representation in an operational ensemble Kalman filter. *Monthly Weather Review* **137**(7) : 2126–2143.

Ingleby NB. 2001. The statistical structure of forecast errors and its representation in the Met Office global 3-D variational data assimilation scheme. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **127**(571) : 209–231.

Isserlis L. 1916. On certain probable errors and correlation coefficients of multiple frequency distributions with skew regression. *Biometrika* **11**(3) : 185–190.

Isserlis L. 1918. On a formula for the product-moment coefficient of any order of a normal frequency distribution in any number of variables. *Biometrika* **12**(1/2) : 134–139.

Jensen J. 1906. Sur les fonctions convexes et les inégalités entre les valeurs moyennes. *Acta Mathematica* **30**(1) : 175–193.

Julier S, Uhlmann J. 2004. Unscented filtering and nonlinear estimation. *Proceedings of the IEEE* **92**(3) : 401–422.

Kalman RE. 1960. A new approach to linear filtering and prediction problems. *Journal of basic Engineering* **82**(1) : 35–45.

Khinchin AY. 1934. Korrelationstheorie der stationären stochastischen prozesse. *Mathematische Annalen* **109** : 604–615.

Knuth DE. 1997. *Art of computer programming, volume 2 : Seminumerical algorithms (3rd edition)*. Addison-Wesley Professional, 3 edn.

Lafore JP, Stein J, Asencio N, Bougeault P, Ducrocq V, Duron J, Fischer C, Héreil P, Mascart P, Masson V, Pinty JP, Redelsperger JL, Richard E, Vilà-Guerau de Arellano J. 1998. The Meso-NH atmospheric simulation system. Part I : adiabatic formulation and control simulations. *Annales Geophysicae* **16**(1) : 90–109.

Le Dimet FX, Talagrand O. 1986. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations : theoretical aspects. *Tellus A* **38A**(2) : 97–110.

Liu C, Xiao Q, Wang B. 2008. An ensemble-based four-dimensional variational data assimilation scheme. part I : Technical formulation and preliminary test. *Monthly Weather Review* **136**(9) : 3363–3373.

Liu C, Xiao Q, Wang B. 2009. An ensemble-based four-dimensional variational data assimilation scheme. part II : Observing system simulation experiments with advanced research wrf (arw). *Monthly Weather Review* **137**(5) : 1687–1704.

Lorenc AC. 2003. The potential of the ensemble Kalman filter for NWP - a comparison with

4D-Var. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **129**(595) : 3183–3203.

Lorenc AC, Ballard SP, Bell RS, Ingleby NB, Andrews PLF, Barker DM, Bray JR, Clayton AM, Dalby T, Li D, Payne TJ, Saunders FW. 2000. The met. office global three-dimensional variational data assimilation scheme. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **126**(570) : 2991–3012.

Lorenz EN. 1963. Deterministic nonperiodic flow. *Journal of the Atmospheric Sciences* **20**(2) : 130–141.

Ménétrier B, Montmerle T. 2011. Heterogeneous background-error covariances for the analysis and forecast of fog events. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **137**(661) : 2004–2013.

Ménétrier B, Montmerle T, Berre L, Michel Y. 2014a. Estimation and diagnosis of heterogeneous flow-dependent background-error covariances at the convective scale using either large or small ensembles. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* doi : 10.1002/qj.2267.

Ménétrier B, Montmerle T, Michel Y, Berre L. 2014b. Linear filtering of sample covariances for ensemble-based data assimilation. part i : Optimality criteria and application to variances filtering and covariances localization. *Monthly Weather Review* : submitted.

Ménétrier B, Montmerle T, Michel Y, Berre L. 2014c. Linear filtering of sample covariances for ensemble-based data assimilation. part ii : Application to a convective-scale nwp model. *Monthly Weather Review* : submitted.

Michel Y. 2012a. Estimating deformations of random processes for correlation modelling in a limited area model. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **139** : 534–547.

Michel Y. 2012b. Estimating deformations of random processes for correlation modelling : methodology and the one-dimensional case. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **139** : 771–783.

Michel Y, Auligné T, Montmerle T. 2011. Heterogeneous convective-scale background error covariances with the inclusion of hydrometeor variables. *Monthly Weather Review* **139**(9) : 2994–3015.

Mirouze I, Weaver AT. 2010. Representation of correlation functions in variational assimilation using an implicit diffusion operator. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **136**(651) : 1421–1443.

Montmerle T, Berre L. 2010. Diagnosis and formulation of heterogeneous background-error covariances at the mesoscale. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **136**(651) : 1408–1420.

Montmerle T, Faccani C. 2009. Mesoscale assimilation of radial velocities from doppler radars in a preoperational framework. *Monthly Weather Review* **137**(6) : 1939–1953.

Montmerle T, Rabier F, Fischer C. 2007. Relative impact of polar-orbiting and geostationary satellite radiances in the ALADIN/France numerical weather prediction system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **133**(624) : 655–671.

Muirhead RI. 2005. *Aspects of multivariate statistical theory*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.

Pagé C, Fillion L, Zwack P. 2007. Diagnosing summertime mesoscale vertical motion : Implications for atmospheric data assimilation. *Monthly Weather Review* **135**(6) : 2076–2094.

Pannekoucke O, Berre L, Desroziers G. 2008. Background-error correlation length-scale estimates and their sampling statistics. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **134**(631) : 497–508.

Pannekoucke O, Massart S. 2008. Estimation of the local diffusion tensor and normalization for heterogeneous correlation modelling using a diffusion equation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **134**(635) : 1425–1438.

Parrish DF, Derber JC, Purser RJ, Wu WS, Pu ZX. 1997. The NCEP global analysis system : Recent improvements and future plans. *Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II* **75**(1B) : 359–365.

Purser RJ, Wu WS, Parrish DF, Roberts NM. 2003a. Numerical aspects of the application of recursive filters to variational statistical analysis. part I : Spatially homogeneous and isotropic gaussian covariances. *Monthly Weather Review* **131**(8) : 1524–1535.

Purser RJ, Wu WS, Parrish DF, Roberts NM. 2003b. Numerical aspects of the application of recursive filters to variational statistical analysis. part II : Spatially inhomogeneous and anisotropic general covariances. *Monthly Weather Review* **131**(8) : 1536–1548.

Radnoti G. 1995. Comments on "A spectral limited-area formulation with time-dependent boundary conditions applied to the shallow-water equations". *Monthly Weather Review* **123**(10) : 3122–3123.

Raynaud L, Berre L, Desroziers G. 2008. Spatial averaging of ensemble-based background-error variances. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **134**(633) : 1003–1014.

Raynaud L, Berre L, Desroziers G. 2009. Objective filtering of ensemble-based background-error variances. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **135**(642) : 1177–1199.

Raynaud L, Berre L, Desroziers G. 2011. An extended specification of flow-dependent background error variances in the Météo-France global 4D-Var system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **137**(656) : 607–619.

Raynaud L, Berre L, Desroziers G. 2012. Accounting for model error in the Météo-France ensemble data assimilation system. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **138**(662) : 249–262.

Raynaud L, Pannekoucke O. 2012. Sampling properties and spatial filtering of ensemble background-error length-scales. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **139** : 784–794.

Sakov P, Oke PR. 2008. A deterministic formulation of the ensemble kalman filter : an alternative to ensemble square root filters. *Tellus A* **60**(2) : 361–371.

Sangster WE. 1960. A method of representing the horizontal pressure force without reduction of station pressures to sea level. *Journal of Meteorology* **17**(2) : 166–176.

Schur J. 1911. Bemerkungen zur theorie der beschränkten bilinearformen mit unendlich vielen veränderlichen. *Journal für die reine und angewandte Mathematik* **140** : 1–28.

Seity Y, Brousseau P, Malardel S, Hello G, Bénard P, Bouttier F, Lac C, Masson V. 2011. The AROME-france convective-scale operational model. *Monthly Weather Review* **139**(3) : 976–991.

Sherman J, Morrison WJ. 1949. Adjustment of an inverse matrix corresponding to changes in a given column or a given row of the original matrix. *The Annals of Mathematical Statistics* **20**(4) : 620–624.

Sherman J, Morrison WJ. 1950. Adjustment of an inverse matrix corresponding to a change in one element of a given matrix. *The Annals of Mathematical Statistics* **21**(1) : 124–127.

Simmons AJ, Hollingsworth A. 2002. Some aspects of the improvement in skill of numerical weather prediction. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **128**(580) : 647–677.

Stefanescu SE, Berre L, Pereira MB. 2006. The evolution of dispersion spectra and the evaluation of model differences in an ensemble estimation of error statistics for a limited-area analysis. *Monthly Weather Review* **134**(11) : 3456–3478.

Talagrand O. 1999. A posteriori verification of analysis and assimilation algorithms. In : *ECMWF Workshop on Diagnosis of Data Assimilation Systems*. Reading, pp. 17–28.

Talagrand O, Courtier P. 1987. Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint vorticity equation. i : Theory. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological*

Society **113**(478) : 1311–1328.

Tarantola A. 2005. *Inverse problem theory and methods for model parameter estimation*. SIAM.

Tippett MK, Anderson JL, Bishop CH, Hamill TM, Whitaker JS. 2003. Ensemble square root filters. *Monthly Weather Review* **131**(7) : 1485–1490.

Trémolet Y. 2006. Accounting for an imperfect model in 4d-var. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **132**(621) : 2483–2504.

Varella H, Berre L, Desroziers G. 2011. Diagnostic and impact studies of a wavelet formulation of background-error correlations in a global model. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **137**(658) : 1369–1379.

Vetra-Carvalho S, Dixon M, Migliorini S, Nichols NK, Ballard SP. 2012. Breakdown of hydrostatic balance at convective scales in the forecast errors in the met office unified model. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **138**(668) : 1709–1720.

Wang X, Barker DM, Snyder C, Hamill TM. 2008a. A hybrid ETKF-3DVAR data assimilation scheme for the WRF model. part I : Observing system simulation experiment. *Monthly Weather Review* **136**(12) : 5116–5131.

Wang X, Barker DM, Snyder C, Hamill TM. 2008b. A hybrid ETKF-3DVAR data assimilation scheme for the WRF model. part II : Real observation experiments. *Monthly Weather Review* **136**(12) : 5132–5147.

Wang X, Snyder C, Hamill TM. 2007. On the theoretical equivalence of differently proposed ensemble 3DVAR hybrid analysis schemes. *Monthly Weather Review* **135**(1) : 222–227.

Wattrelot E, Caumont O, Mahfouf JF. 2014. Operational implementation of the 1D+3D-Var assimilation method of radar reflectivity data in the AROME model. *Monthly Weather Review* doi :10.1175/MWR-D-13-00230.1.

Weaver AT, Mirouze I. 2012. On the diffusion equation and its application to isotropic and anisotropic correlation modelling in variational assimilation. *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society* **139** : 242–260.

Welford BP. 1962. Note on a method for calculating corrected sums of squares and products. *Technometrics* **4**(3) : 419–420.

Whitaker JS, Hamill TM. 2002. Ensemble data assimilation without perturbed observations. *Monthly Weather Review* **130**(7) : 1913–1924.

Whitaker JS, Hamill TM. 2012. Evaluating methods to account for system errors in ensemble data assimilation. *Monthly Weather Review* **140**(9) : 3078–3089.

Wiener N. 1930. Generalized harmonic analysis. *Acta Mathematica* **55** : 117–258. 10.1007/BF02546511.

Wiener N. 1949. *Extrapolation, interpolation, and smoothing of stationary time series, with engineering applications.* Technology Press of the Massachusetts Institute of Technology : Cambridge.

Wishart J. 1928. The generalised product moment distribution in samples from a normal multivariate population. *Biometrika* **20A**(1/2) : 32–52.

Wu WS, Purser RJ, Parrish DF. 2002. Three-dimensional variational analysis with spatially inhomogeneous covariances. *Monthly Weather Review* **130**(12) : 2905–2916.

Zupanski M. 2005. Maximum likelihood ensemble filter : Theoretical aspects. *Monthly Weather Review* **133**(6) : 1710–1726.