

大气海洋环境数值模拟中的若干计算问题^{*}

季仲贞 王斌 曾庆存

(中国科学院大气物理研究所大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室, 北京 100029)

摘 要 为了适应发展气候数值模拟和环境数值模拟的需要, 综合介绍了与此密切有关的若干计算问题。首先, 指出这类问题易于出现计算紊乱、非物理解和非线性计算不稳定, 同时, 简要介绍造成这些问题出现的三种机理: 虚假频散、能量关系破坏和能谱的非线性转移。然后, 把这类问题归结为一种“发展方程”, 给出了与此有关的几个定理, 阐述了计算稳定性、能量守恒性和算子非负性之间的密切关系。接着, 分别介绍了多种完全平方守恒的差分格式的构造方法, 其中包括隐式的和显式的完全平方守恒的差分格式, 高时间精度和高阶紧致的完全平方守恒的差分格式, 同时也给出若干具体算例说明这些格式的计算效果。最后, 对全文作了小结, 并指出今后应进一步研究的若干重要问题。

关键词 气候数值模拟 环境数值模拟 计算紊乱 非线性计算不稳定 完全平方守恒 紧致差分格式

1 引言

根据国家实施的科技、经济、社会与人口、资源、环境协调发展的可持续发展战略, 及“分清层次, 突出重点, 有所为有所不为”的指导思想, 积极发展计算地球流体力学和大力加强大气、海洋和环境数值模拟研究有十分重要的意义。当然, 开展这些数值模拟问题研究离不开与此有关的计算方法的研究。就当前来说, 所用的计算方法主要有: 有限差分法、有限元法和谱展开法。由于大气海洋环境数值模拟问题大多需要作大规模长时间的数值积分, 而且需要描写多种时间和空间尺度相互作用的复杂系统, 因此为了使各种数值模拟取得成功必须很好地解决计算稳定性、计算准确性和计算省时性问题。与计算稳定性和准确性有关的主要有如何克服计算紊乱和非线性计算不稳定以及如何避免非物理解的问题。围绕着这些问题, 几十年来, 开展了一系列问题的研究, 也取得许多较好的成果。本文仅就有限差分法中如何避免出现非线性计算不稳定, 构造完全平方守恒的差分格式等问题作一些具体介绍。

由于描写大气、海洋和环境问题的微分方程在一定条件下具有总能量守恒性或平方守恒性, 因此作为避免出现非线性计算不稳定出现的重要措施, 我们一直十分重视如何构造具有相应性质的差分格式问题。多年来, 在构造完全平方守恒差分格式方面大致经历了三大阶段, 即: 隐式完全平方守恒格式、显式完全平方守恒格式和高精度完全平方

1998-10-05 收到

^{*} 国家攀登预选项目“大规模科学与工程计算方法和理论”和国家杰出青年科学基金49825109资助

守恒格式的构造。由此,使问题步步深化,也使差分格式的构造逐步符合实际需要。下面结合若干典型方程,分几个问题叙述如下。

2 问题和机理

所有偏微分方程的近似解法都是用一个有限个自由度的物理的或力学的系统来模拟一个连续介质系统,为了保证计算的准确性和稳定性,我们希望原来系统中的物理性质和物理规律在近似方程中尽可能多地保留下来,或者说尽可能少地遭到歪曲和破坏。早在 1965 年,曾庆存就指出计算紊乱现象和计算不稳定现象出现是由三种主要机理造成的,即频散效应、能量增长效应和能谱非线性转移效应。

2.1 频散效应

考虑线性平流方程:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + U \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

其中, $U > 0$ 为常数, φ 以相速 U 传播,不变形。

如果把 (1) 式中的空间偏导数项用中央差商代替,可得

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + U \frac{\varphi_{k+1} - \varphi_{k-1}}{2\Delta x} = 0, \quad (2)$$

取特解 $\varphi_k(t) = \varphi_m e^{im(x_k - c_m t)}$ 代入上方程,可得

$$c_m = U \varepsilon_m,$$

其中, $\varepsilon_m = \sin m \Delta x / m \Delta x$, 当 $m \rightarrow \infty$ 时, $\varepsilon_m = 0$; 而当 $m \rightarrow 0$ 时, $\varepsilon_m = 1$ 。可见,用 (2) 式模拟 (1) 式,使波动相速度变慢,波长越短,相速误差越大,且具有频散性质。

2.2 能量增长效应

从能量守恒律的角度看, (2) 式是能保持总能量守恒的,当然我们还可以构造出多种能保持总能量守恒的差分格式,如下的隐式格式就是其中之一:

$$\frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} + U \frac{\bar{\varphi}_{k+1} - \bar{\varphi}_{k-1}}{2\Delta x} = 0, \quad (3)$$

其中, $\bar{\varphi}_k = (\varphi_k^{n+1} + \varphi_k^n) / 2$ 。然而,如下两个格式就是破坏了能量守恒律的常见格式:

显式前差格式

$$\frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} + U \frac{\varphi_{k+1}^n - \varphi_{k-1}^n}{2\Delta x} = 0 \quad (4)$$

是能量增长的;而逆风格式

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} + U \frac{\varphi_k - \varphi_{k-1}}{2\Delta x} = 0 \quad (U > 0) \quad (5)$$

是能量衰减的。

2.3 能谱非线性转移效应和非线性计算不稳定

对于变系数方程和非线性方程, 也存在频散性质和能量关系, 也可以进行类似上述的分析。此外, 在变系数方程和非线性方程中还可以出现能量沿波长转移, 产生出新波, 甚至能量可以不断地向短波转移, 以致出现“计算湍流现象”, 也可能出现非线性计算不稳定。

考虑非线性平流方程

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0, & 0 \leq x \leq 1, t \geq 0 \\ u(x, 0) = g(x), \end{cases} \quad (6)$$

特别地, 取

$$u(x, 0) = 1.5 + \sin 2\pi x. \quad (7)$$

在周期边界条件下, (6) 式有如行波解

$$u(x, t) = 1.5 + \sin 2\pi(x - ut). \quad (8)$$

显然, 这时总有 $|u(x, t)| \leq 2.5$ 即 $u(x, t)$ 是有界的。

用如下 3 个格式来逼近 (6) 式:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{u_{j+1}^n + 2u_j^n + u_{j-1}^n}{4} \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + \frac{u_{j+1}^n + u_j^n + u_{j-1}^n}{3} \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0, \quad (10)$$

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{\bar{u}_{j+1} + \bar{u}_j + \bar{u}_{j-1}}{3} \frac{\bar{u}_{j+1} - \bar{u}_{j-1}}{2\Delta x} = 0, \quad (11)$$

其中, $\bar{u}_j = (u_j^{n+1} + u_j^n)/2$ 等等。

定义

$$\|u\|^2 = (u, u) = \sum_j u_j^2 \Delta x. \quad (12)$$

不难验证在周期边界条件下 (11) 式有

$$\|u^{n+1}\| = \|u^n\|. \quad (13)$$

这表明, 格式 (12) 保持了原来微分方程所具有的总能量守恒性, 不会出现非线性计算不稳定现象。然而, 对于格式 (9) 和 (10) 来说, 情况大不一样了, 我们作如下的数值检验:

取 $\Delta x = 0.1$, $\Delta t = 0.004$, 而初值取如下两种:

$$(1) \quad u(x, 0) = 1.5 + \sin 2\pi x, \quad (14)$$

$$(2) \quad u(x, 0) = \sin 2\pi x. \quad (15)$$

计算结果如图 1 和图 2 所示, 从图上可得如下 3 点结论:

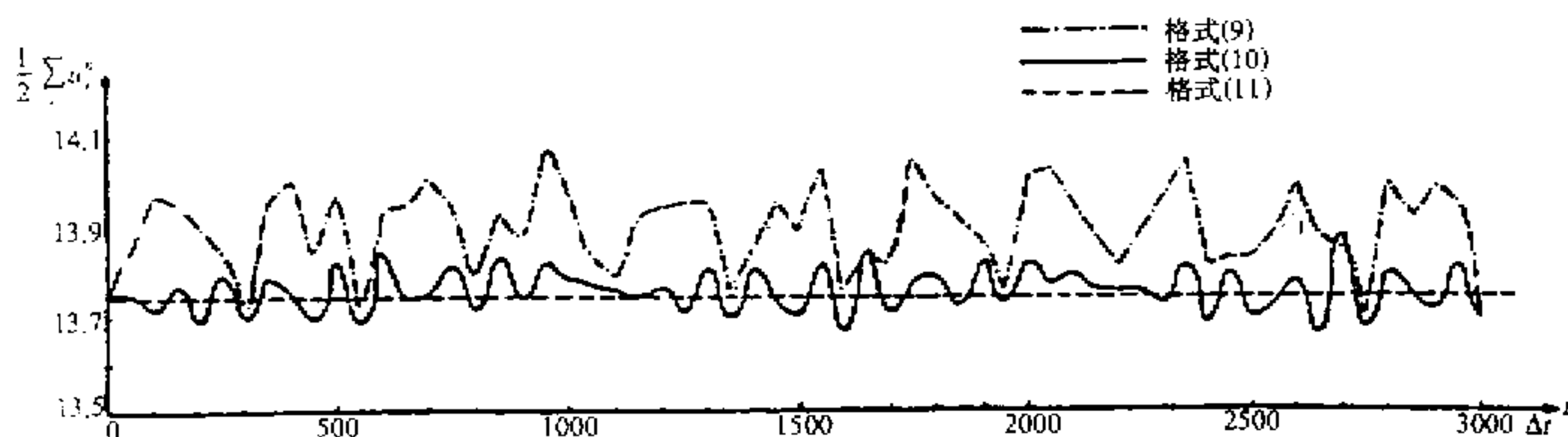


图1 $u(x, 0) = 1.5 + \sin 2\pi x$, $\Delta x = 0.1$ 时总动能变化曲线

(1) 不论取哪种初值, 格式(11)绝对稳定, 尽管对格式(11)的计算也存在混淆误差, 但由于格式的平方守恒性, 并不会造成非线性计算不稳定。

(2) 在初始值取(14)的情况下, 格式(9)和(10)的总能量总在一定范围内变化, 它们是有界的, 也不会出现非线性计算不稳定现象。

(3) 在初值取(15)的情况下, 格式(9)和(10)总能量出现了突变式的增长, 从而先后都出现了非线性计算不稳定现象。

3 计算稳定性、算子非负性和能量守恒性之间的关系

一般可以把大气、海洋、环境数值模拟方程组归结为如下形式的“发展方程”:

$$\partial F / \partial t + \tilde{A}F = G, \quad (16)$$

其中, $F = F(x, t)$ 是待求函数, $\tilde{A} = \tilde{A}(F, x, t)$ 是一个非线性或线性算子, $x = x(x_1, x_2, \dots, x_k)$ 是空间价值, k 是空间维数, t 是时间坐标, G 是已知函数。

令 τ 为时间步长, h 为空间步长, 在 (x, t) 空间布网后, 可将与(16)式对应的差分格式写为

$$\frac{F^{n+1} - F^n}{\tau} + A_\theta(F^*)[\alpha F^{n+1} + (1 - \alpha)F^n] = G^{n+1,n}, \quad (17)$$

其中, A_θ 是与 $\tilde{A}$ 相应的差分算子, F^* 为 F 的某种光滑值, $0 \leq \alpha \leq 1$ 。

定义两个网格函数 F 和 G 的内积为

$$(G, F) = \sum_m F_m G_m \Delta_m. \quad (18)$$

在一维情形, $\Delta_m = h$, 在二维情形, $\Delta_m = h^2$, 而范数则取为

$$\|F\| = (F, F)^{1/2}. \quad (19)$$

为了讨论问题简便, 以下不妨取(16)式右端函数 $G \equiv 0$ 。

定义1 若当 τ 足够小时, 由差分算得的解满足

$$\|F^{n+1}\| \leq \|F^n\|, \quad (20)$$

则称差分格式为计算稳定的。

定义 2 如果差分算子 A 满足

$$(AF, F) \geq 0, \quad (21)$$

则称 A 为非负的, 而当等式成立时, 则称 A 为反对称的。

由于我们面临的方程常常是非线性的, 正如文献[1]中所指出的在近似计算中常常易于出现非线性计算不稳定。为了保证我们的计算格式是稳定的, 我们已证明了如下定理^[2~4]。

定理 1 若 A 为非负算子且 $1 \geq \alpha \geq 1/2$ 时, 则格式 (17) 无条件稳定; 若 A 为反对称的且 $0 \leq \alpha < 1/2$ 时, 则格式 (17) 绝对不稳定。

定理 2 若 $(AF, F) = 0$ 且 $\alpha = 1/2$, 则格式 (17) 有如下守恒性:

(1) 能量守恒:

$$\|F^{n+1}\|^2 = \|F^n\|^2 = \|F^0\|^2, \quad (22)$$

(2) “广义能量”守恒:

$$\|F^n\|^2 = \frac{\tau^2}{4} \|AF^n\| = \text{常数}, \quad (23)$$

(3) “平均尺度”守恒:

$$\frac{\|F^n\|^2}{\|AF^n\|} = \text{常数}. \quad (24)$$

定理 3 对于格式 (17), 如果采用如下预估-校正算法计算:

$$\begin{cases} F^* = F^n - \tau A_0(F^n)F^n, \\ F^{n+1} = F^n - \tau A_0(F^*)[\alpha F^{n+1} + (1-\alpha)F^n]. \end{cases} \quad (25)$$

那么, 只要算子 A 是非负的且 $1/2 \leq \alpha \leq 1$ 时, 则算法 (25) 总是计算稳定的。

定理 4 对于格式 (17), 取 $\alpha = 1/2$, 若 $A = A_1 + A_2$ 且 A_1 和 A_2 均为非负的, 那么如下分解算法是计算稳定的:

$$\begin{cases} \frac{F^{n+1/2} - F^n}{\tau} + A_1 \frac{F^{n+1/2} + F^n}{2} = 0, \\ \frac{F^{n+1} - F^{n+1/2}}{\tau} + A_2 \frac{F^{n+1} + F^{n+1/2}}{2} = 0, \end{cases} \quad (26)$$

上述定理 1 和定理 2 是两个较普遍的定理, 把计算稳定性、算子非负性和能量守恒性之间的密切关系揭示出来了, 它为发展“隐式完全能量守恒差分法”奠定了理论基础,

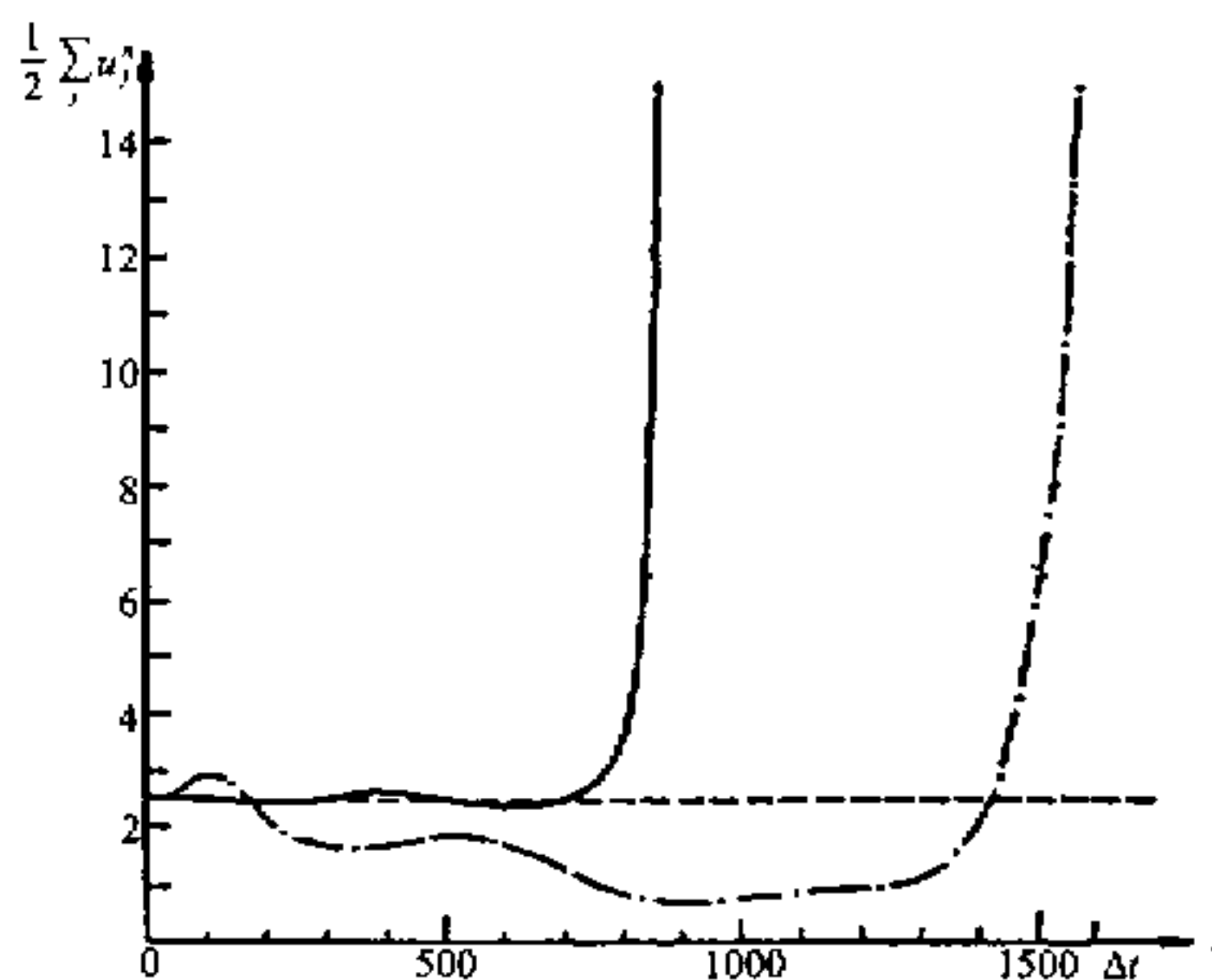


图 2 $u(x, 0) = \sin 2\pi x$, $\Delta x = 0.1$ 时总动能变化曲线
说明同图 1

并使我们能把讨论格式稳定性问题转化为构造非负差分算子的问题,这是十分有意义的。

4 隐式完全能量守恒差分格式的构造

从定理 1 和定理 2 我们已看到,只要差分算子 A 是非负的,在强隐式情形(即 $1 \geq \alpha \geq 1/2$)下,格式(17)是绝对稳定的。如何才能保证差分算子 A 是非负的呢?对于非跳点网格(A 网格)在文献[5]中已介绍了多种构造方法。下面,从一个简单例子出发,着重介绍跳点格网(C 网格)情况下完全平方守恒(包括完全能量守恒)的隐式格式的构造方法。

考虑一维重力波方程

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + g \frac{\partial h}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial h}{\partial t} + u \frac{\partial h}{\partial x} + h \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad (27)$$

显然,(27)式也易于写成算子方程(16)的形式。不难验证(27)具有如下能量守恒性:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^2 \frac{1}{2} [ghu^2 + (gh)^2] dx = 0. \quad (28)$$

为了便于构造出保持相应能量性质的差分格式,取如图 3 所示的交错网格,并把方程(27)改写为如下形式:

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{1}{2} \left(2 \frac{\partial u U}{\partial x} - U \frac{\partial u}{\partial x} \right) + C \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (CU) = 0, \end{cases} \quad (29)$$

其中, $U = cu, C = \sqrt{\varphi}, \varphi = gh$ 。

令

$$\begin{cases} F_i = \frac{F^{n+1} - F^n}{\tau}, & \bar{F} = \frac{F^{n+1} + F^n}{2}, \\ \bar{F}_{i+1/2}^x = \frac{F_{i+1} + F_i}{2}, & \bar{F}_i^x = \frac{F_{i+1/2} + F_{i-1/2}}{2}, \\ (F_x)_{i+1/2} = \frac{F_{i+1} - F_i}{h}, & (F_x)_i = \frac{F_{i+1/2} - F_{i-1/2}}{h}, \end{cases} \quad (30)$$

$i = 1, 2, \dots, L-1$

其中, F 可取为 u, U 或 φ 等变量。

于是,与(29)式对应的差分格式可写为:



图3 一维变量分布图

$$\begin{cases} (U_i)_{i+1/2} + [(\bar{u}^x \bar{U}^x)_x - \frac{1}{2} U \bar{u}_x^x]_{i+1/2} + (\bar{C}^x \phi_x)_{i+1/2} = 0, \\ (\phi_i)_i + [(\bar{C}^x U)_x]_i = 0. \end{cases} \quad (31)$$

假设 F, G 为在区间 $(0, L)$ 上定义的任意两个网格函数, 利用 (30) 不难验证如下 3 个恒等式成立:

$$\sum_{i=1}^{L-1} (FG_x)_i + \sum_{i=0}^{L-1} (GF_x)_{i+1/2} = F_L G_{L-1/2} - F_0 G_{1/2}, \quad (32)$$

$$[(\bar{F}^x G)_x]_{i+1/2} = (G \bar{F}_x^x)_{i+1/2} + [(\bar{F}^x G_x)]_{i+1/2}^x, \quad (33)$$

$$[(\bar{F}^x \tilde{G}^2)_x]_{i+1/2} = (G^2 \bar{F}_x^x)_{i+1/2} + 2[G(\bar{F}^x G_x)]_{i+1/2}^x, \quad (34)$$

其中, $\tilde{G}_i^2 = G_{i+1/2} G_{i-1/2}$ 。

利用 (33) 式可得:

$$\begin{aligned} [(\bar{u}^x \bar{U}^x)]_{i+1/2} - \frac{1}{2} (U \bar{u}_x^x)_{i+1/2} &= (U \bar{u}_x^x)_{i+1/2} + \overline{(\bar{u}^x U_x)}_{i+1/2}^x - \frac{1}{2} (U \bar{u}_x^x)_{i+1/2} \\ &= \frac{1}{2} [(U \bar{u}_x^x)_{i+1/2} + 2 \overline{(\bar{u}^x U_x)}_{i+1/2}^x]. \end{aligned} \quad (35)$$

在 (35) 式两边同乘 $U_{i+1/2}$ 并对 i 求和, 利用 (34) 式可得

$$\begin{aligned} \sum_i U_{i+1/2} [(\bar{u}^x \bar{U}^x)_x - \frac{1}{2} (U \bar{u}_x^x)]_{i+1/2} &= \sum_i U_{i+1/2}^2 (\bar{u}_x^x)_{i+1/2} + \sum_i 2 [U \overline{(\bar{u}^x U)}]_{i+1/2}^x \\ &= \sum_i [(\bar{u}^x \tilde{U}^2)_x]_{i+1/2} = \text{边界项} = 0. \end{aligned} \quad (36)$$

此外, 利用 (32) 式可得

$$\sum_i U_{i+1/2} (\bar{C}^x \phi_x)_{i+1/2} + \sum_i \phi_i [(\bar{C}^x U)_x]_i = \text{边界项} = 0. \quad (37)$$

如果把 (31) 式中的各空间差分项均取为隐式的, 即以 $\bar{U}$ 代 U , 以 $\bar{u}$ 代 u , 以 $\bar{\phi}$ 代 ϕ 等, 并用 $U_{i+1/2}$ 和 ϕ_i 分别乘 (31) 的两式, 求和后再相加之, 利用 (36) 和 (37) 式, 可得

$$\sum_i \left[\frac{(U^{n+1})^2 - (U^n)^2}{\tau} \right]_{i+1/2} + \sum_i \left[\frac{(\phi^{n+1})^2 - (\phi^n)^2}{\tau} \right]_i = 0, \quad (38)$$

这就是 (28) 式在差分离散化情况下的表现形式, 它表明差分格式 (31) 满足总能量守

恒。上述办法完全可以推广到二维、三维情形。

例如, 对于二维全流方程

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial \phi}{\partial x} + fv + K_1 \Delta u - K_2 u + F_x, \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial \phi}{\partial y} - fu + K_1 \Delta v - K_2 v + F_y, \\ \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial uh}{\partial x} + \frac{\partial vh}{\partial y} = 0. \end{cases} \quad (39)$$

满足如下能量关系式:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \iint \frac{1}{2} (U^2 + V^2 + \phi^2) dx dy = & \iint \left\{ K_1 \Phi \left[U \Delta \left(\frac{U}{\Phi} \right) + V \Delta \left(\frac{V}{\Phi} \right) \right] + K_2 (U^2 + V^2) \right. \\ & \left. + \phi (F_x U + F_y V) \right\} dx dy. \end{aligned} \quad (40)$$

如果忽略风应力项和摩擦力项, 则有如下总能量守恒方程:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint [U^2 + V^2 + \phi^2] dx dy = 0, \quad (41)$$

其中, $U = \sqrt{gh} u$, $V = \sqrt{gh} v$, $\Phi = \sqrt{gh} = \sqrt{\phi - gh_s}$ 。我们可以在 C 网格下构造对应于 (39) 的差分格式如下:

$$\begin{cases} (U_t)_{i+1/2,j} + [(\bar{u}^x \bar{U}^x)_x - \frac{1}{2} U \bar{u}_x^x]_{i+1/2,j} + [(\bar{V}^x \bar{U}^y)_y - \frac{1}{2} U \bar{v}_y^x]_{i+1/2,j} \\ = [f \bar{v}^{xy} - \bar{\Phi}^x \phi_x]_{i+1/2,j} + [k_1 \Phi \Delta (U/\Phi) - k_2 U + \bar{\Phi}^x \bar{F}_x]_{i+1/2,j}, \\ (V_t)_{i,j+1/2} + [(\bar{u}^y \bar{V}^x)_x - \frac{1}{2} V \bar{u}_x^y]_{i,j+1/2} + [(\bar{v}^y \bar{V}^y)_y - \frac{1}{2} V \bar{v}_y^y]_{i,j+1/2} \\ = [-f \bar{U}^{xy} - \bar{\Phi}^y \phi_y]_{i,j+1/2} + [K_1 \Phi \Delta (V/\Phi) - K_2 V + \bar{\Phi}^y \bar{F}_y]_{i,j+1/2}, \\ (\phi_t)_{i,j} + [(U \bar{\Phi}^x)_x + (V \bar{\Phi}^y)_y]_{i,j} = 0. \end{cases} \quad (42)$$

如果忽略 (42) 中的摩擦项和风应力项, 当方程取隐式时, 同样可以证明有如下能量关系式:

$$\sum \sum (U_{i+1/2,j}^n)^2 + \sum \sum (V_{i,j+1/2}^n)^2 + \sum \sum (\phi_{i,j}^n)^2 = \text{常数}. \quad (43)$$

5 显式完全平方守恒格式的构造^[6]

前述的隐式完全平方守恒格式虽然是稳定的, 但具体求解不甚方便, 甚至是较费机时的。为了克服这个困难, 下面我们进一步阐述显式完全平方守恒差分格式的构造方法。

考虑发展方程

$$\frac{\partial F}{\partial t} = -\tilde{A}F, \quad (44)$$

对 t 微分一次得

$$\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} = -\frac{\partial \tilde{A}F}{\partial t}. \quad (45)$$

对网格函数 F_j^{n+1} 关于 F_j^n 作 Taylor 展开可得

$$F_j^{n+1} = F_j^n + \tau \left(\frac{\partial F}{\partial t} \right)_j^n + \frac{\tau^2}{2} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} \right)_j^n + \dots \quad (46)$$

以 (44) 和 (45) 代入 (46) 可得

$$F_j^{n+1} = F_j^n - \tau(\tilde{A}F)_j^n - \frac{\tau^2}{2} \left(\frac{\partial \tilde{A}F}{\partial t} \right)_j^n + \dots \quad (47)$$

按照文献[7]中的灵活性替代的观点, 可把 (47) 改写为

$$\frac{F_j^{n+1} - F_j^n}{\tau} + (AF)_j^n + \varepsilon_n \frac{\tau}{2} \left(\frac{\delta AF}{\delta t} \right)_j^n = 0, \quad (48)$$

其中, $(A)_j^n$ 为 t_n 时对应于 $\tilde{A}$ 的空间差分算子, $(\delta AF / \delta t)_j^n$ 为 t_n 时对应于 $\partial \tilde{A}F / \partial t$ 的差分表达式, ε_n 为待定系数, 或称为灵活性系数, 我们可以通过适当选取系数 ε_n 达到使 (48) 保持完全平方守恒的目的.

为了讨论方便, 不妨把 (48) 式左边第 3 项推广写为 $\varepsilon_n \tau B$ 的形式, 其中 B 称之为耗散算子, ε_n 可称之为耗散系数. 令

$$(L_n F)_j^n \equiv (A_n F)_j^n + \varepsilon_n \tau (B^n F)_j^n. \quad (49)$$

于是, (48) 可改写为

$$\frac{F_j^{n+1} - F_j^n}{\tau} + (L_n F)_j^n = 0. \quad (50)$$

可以证明如下定理:

定理 5 若成立关系式

$$\tau \|L^n F^n\|^2 - 2(L^n F^n, F^n) = 0, \quad (51)$$

则 (50) 为显式完全平方守恒的差分格式.

定理 6 设 A_n 为反对称算子, B 为正算子, 且 $(B_n F)^n \leq O(1)$ 和 $2K_3 \tau / h < 1$, 则当

$$\varepsilon_n = K_1 / \left[\left(1 - \frac{\tau}{h} K_2 \right) + \sqrt{\left(1 - \frac{\tau}{h} K_2 \right)^2 - \left(\frac{\tau}{h} K_3 \right)^2} \right] \quad (52)$$

时, 格式 (50) 为定时间步长的显式完全平方守恒的差分格式. 其中,

$$\begin{cases} K_1 = \|A_n F^n\|^2 / (B_n F^n, F^n), \\ K_2 = (B_n F^n, A_n F^n)h / (B_n F^n, F^n), \\ K_3 = \|A_n F^n\| \cdot \|B_n F^n\|h / (B_n F^n, F^n). \end{cases} \quad (53)$$

定理 7 在定理 5 中, 若取

$$B_n F^n = \frac{A_n F^n - A_{n-1} F^{n-1}}{\tau}, \quad (54)$$

或

$$B_n F^n = \frac{A^n \tilde{F}^{n+1} - A^n F^n}{\tau}, \quad \tilde{F}^{n+1} = F^n - \tau A^n F^n, \quad (55)$$

或

$$B_n F^n = \frac{A^n \tilde{F}^{n+1} - A_{n-1} F^{n-1}}{2\tau}, \quad (56)$$

则定理 5 成立。只要算子 A 和 B 是可交换的, 不难证明上述显式完全平方守恒差分格式也具有“广义能量”守恒和“平均尺度”守恒的性质。

6 高时间精度的显式平方守恒格式^[8]

如果对 Taylor 展式 (46) 取更多的项, 可得与 (44) 式相容的各种差分格式, 并可称相应的 B 算子为协调耗散算子。一般地, 可取

$$(BF)^n = -2 \left[\frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \dots + \frac{\tau^{m-1}}{(m+1)!} \frac{\partial^{m+1}}{\partial t^{m+1}} \right] F + O(\tau^m), \quad (57)$$

并称 B 为 m 阶协调耗散算子。

定理 8 若 B 为一阶协调耗散算子, 且

$$(BF)^n = - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} \right)^n + O(\tau), \quad (58)$$

则由定理 6 所决定的格式 (50) 关于 τ 是二阶时间精度的。

定理 9 若 B 为二阶协调耗散算子, 且

$$(BF)^n = - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} + \frac{\tau}{3} \frac{\partial^3 F}{\partial t^3} \right)^n + O(\tau^2), \quad (59)$$

则满足定理 6 条件的格式 (50) 关于 τ 是三阶时间精度的。

推论 1 若分别取 B 算子如下:

$$(BF)^n \approx \frac{A F^{n+1} - A F^n}{\tau} = - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} + \frac{\tau}{2} \frac{\partial^3 F}{\partial t^3} \right)^n + O(\tau^2), \quad (60)$$

$$(BF)^n \approx \frac{A F^n - A F^{n-1}}{\tau} = - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} - \frac{\tau}{2} \frac{\partial^3 F}{\partial t^3} \right)^n + O(\tau^2), \quad (61)$$

$$(BF)^n \approx \frac{AF^{n+1} - AF^{n-1}}{2\tau} \approx -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2}\right)^n + o(\tau^2), \quad (62)$$

则此时格式 (50) 为二阶时间精度, B 为一阶耗散算子。

推论 2 若取 B 算子为

$$\begin{aligned} (BF)^n &\approx -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2}\right)^n = \left(\frac{\partial AF}{\partial t}\right)^n \approx \frac{5}{6}\left(\frac{AF^{n+1} - AF^n}{\tau}\right) + \frac{1}{6}\left(\frac{AF^n - AF^{n-1}}{\tau}\right) \\ &= \frac{5AF^{n+1} - 4AF^n - AF^{n-1}}{6\tau} = -\left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} + \frac{\tau}{3}\frac{\partial^3 F}{\partial t^3}\right) + O(\tau^2), \end{aligned} \quad (63)$$

则此时格式 (50) 为三阶时间精度, B 算子为二阶耗散算子。

在实际应用中, 对上述推论中出现的 F^{n+1} 采用如下预估-校正法计算:

$$\begin{cases} F^* = F^n - \tau AF^n \\ \tilde{F}^{n+1} = F^n - \tau A\left(\frac{F^n + F^*}{2}\right) \end{cases} \quad (64)$$

实践证明以 $\tilde{F}_{n+1}$ 代替 F^{n+1} 后, 对格式的时间精度和 B 算子的协调耗散阶数均影响不大。

为了构造更高阶的时间差分精度的格式, 我们借用常微分方程中的 Runge-Kutta 法的思想, 可以构造一些十分实用的格式。

定理 10 若算子 B 满足

$$BF = \frac{2[\varphi(F, \tau) - R_1]}{\tau}, \quad (65)$$

其中,

$$\varphi(F, \tau) = C_1 R_1 + C_2 R_2, \quad (66)$$

而

$$R_1 = -LF, \quad R_2 = -L(F + b_{21}\tau R_1), \quad (67)$$

且系数 C_1, C_2, b_{21} 满足

$$C_1 + C_2 = 1, \quad C_2 b_{21} = \frac{1}{2}, \quad (68)$$

则 B 为一阶协调耗散算子。特别地, 若取 $C_1 = 0, C_2 = 1, b_{21} = 1/2$, 则

$$\begin{cases} BF = \frac{2(LF^* - LF)}{\tau}, \\ F^* = F - \frac{1}{2}\tau LF. \end{cases} \quad (69)$$

此时, B 算子可称为中点 Euler 算子。

定理 11 若取

$$\varphi(F, \tau) = C_1 R_1 + C_2 R_2 + C_3 R_3 + C_4 R_4 \quad (70)$$

和

$$\begin{cases} R_1 = -LF, \\ R_2 = -L(F + b_{21}\tau R_1), \\ R_3 = -L(F + b_{31}\tau R_1 + b_{32}\tau R_2), \\ R_4 = -L(F + b_{41}\tau R_1 + b_{42}\tau R_2 + b_{43}\tau R_3), \end{cases} \quad (71)$$

其中, C_1, C_2, C_3, C_4 及 $b_{21}, b_{31}, b_{32}, b_{41}, b_{42}, b_{43}$ 满足

$$\begin{cases} C_1 + C_2 + C_3 + C_4 = 1, \\ C_2 a_2 + C_3 a_3 + C_4 a_4 = \frac{1}{2}, \\ C_2 a_2^2 + C_3 a_3^2 + C_4 a_4^2 = \frac{1}{3}, \\ C_2 a_2^3 + C_3 a_3^3 + C_4 a_4^3 = \frac{1}{3}, \\ C_3 b_{32} a_2 + C_4 [b_{42} a_2 + b_{43} a_3] = \frac{1}{6}, \\ C_3 a_3 b_{32} a_2 + C_4 a_4 [b_{42} a_2 + b_{43} a_3] = \frac{1}{8}, \\ C_3 b_{21} a_2^2 + C_4 [b_{42} a_2^2 + b_{43} b_3^2] = \frac{1}{12}, \\ C_4 b_{43} b_{32} b_{21} = \frac{1}{24}, \end{cases} \quad (72)$$

而

$$\begin{cases} a_2 = b_{21}, \\ a_3 = b_{31} + b_{32}, \\ a_4 = b_{41} + b_{42} + b_{43}, \end{cases} \quad (73)$$

则由 (65) 式定义的算子 B 为三阶协调耗散算子。

推论 3 在定理 11 中当取

$$\begin{cases} C_1 = \frac{1}{6}, \quad C_2 = \frac{1}{3}, \quad C_3 = \frac{1}{3}, \quad C_4 = \frac{1}{6}, \\ b_{21} = \frac{1}{2}, \quad b_{31} = 0, \quad b_{32} = \frac{1}{2}, \quad b_{41} = 0, \quad b_{42} = 0, \quad b_{43} = 1 \end{cases} \quad (74)$$

时, 我们得到古典 Runge-Kutta 算子

$$BF = -\frac{2(R_2 + R_3) + R_4 - 5R_1}{3\tau}, \quad (75)$$

其中,

$$\begin{cases} R_1 = -LF, \\ R_2 = -L\left(F + \frac{1}{2}\tau R_1\right), \\ R_3 = -L\left(F + \frac{1}{2}\tau R_2\right). \end{cases} \quad (76)$$

我们以四波 Rossby-Haurwitz 波为初始场, 采用 80×20 网格, 用前述的显式完全平方守恒差分格式对北半球进行数值积分, 均得到满意的结果 (见图 4)。图 2 中各结果是用三阶协调耗散算子进行计算的, 所取的 $\tau = 390$ s, 积分一天约需 18 s, 而用原来的一阶协调耗散算子计算时, 积分一天需 50 s; 用二阶协调耗散算子计算一天需 21 s。

用隐式的和三种显式的完全平方守恒格式计算的南海一月平均流, 直观地从图上很难看出各方案数值模拟效果有何不同^[4] (但从计算机输出结果看是有一定差异的), 这主要与海流本身变化较缓、量级较小有关; 但从计算时间看, 各方案的差异就很大, 从表 1 可看到, 显式方案所需的 CPU 时间大致只有隐式方案的 $1/5$ 至 $1/3$ 。

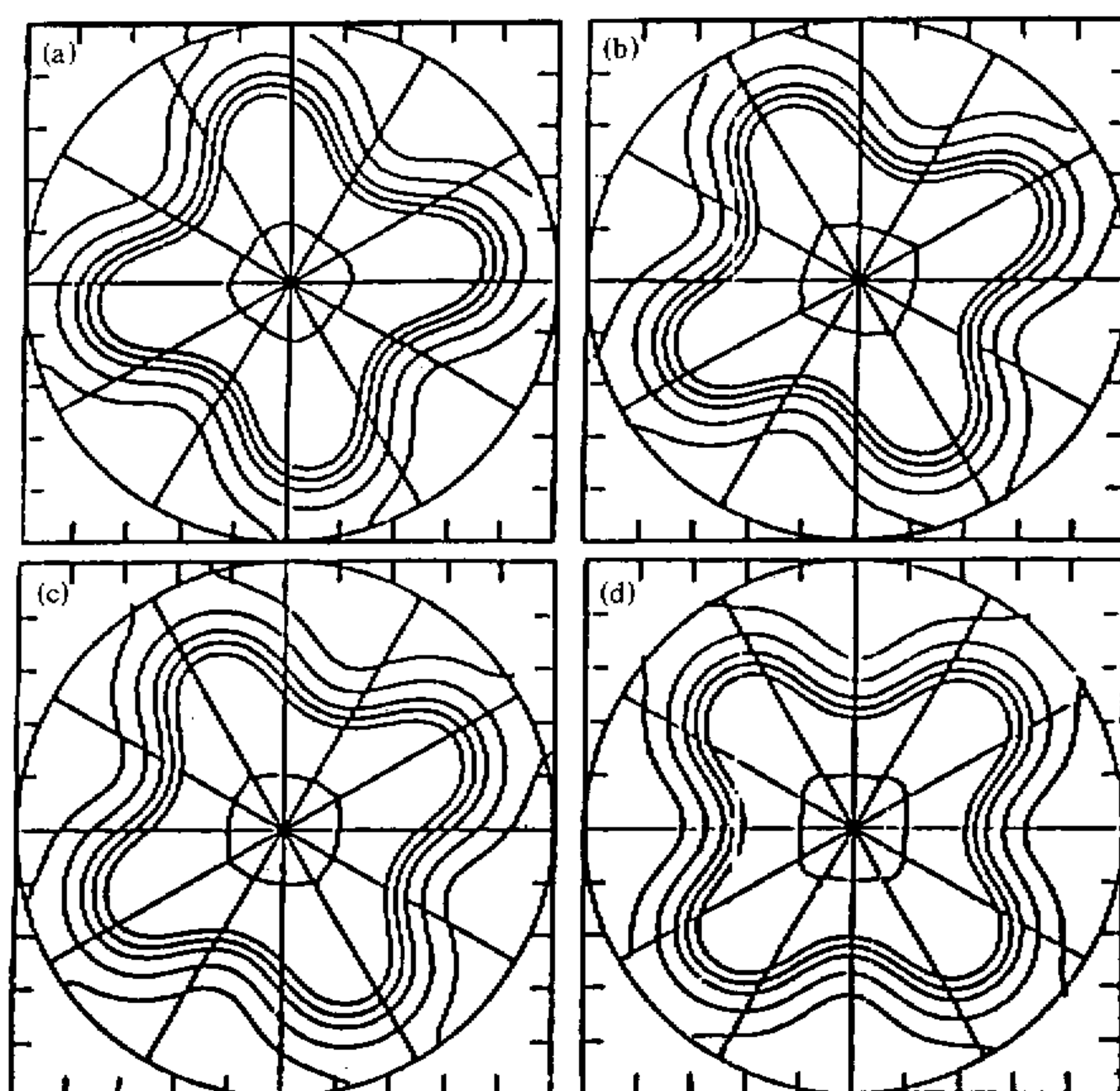


图 4 定步长显式完全平方守恒差分格式数值试验图

计算四波 Rossby-Haurwitz 波

(a) 积分 40 天; (b) 积分 70 天; (c) 积分 100 天; (d) 积分 120 天

表 1 四种方案的结果对比

	原隐式方案	一阶显式方案	一阶简化显式方案	二阶显式方案
积分时间 / d	30	30	30	30
CPU 时间 / min	9.08	2.60	2.12	2.92

7 高空间差分精度的平方守恒格式

前述的工作仅着重介绍了有关时间差分精度的改善。事实上, 为了进一步改善整个计算效果, 提高空间方向的计算精度也是不容忽视的, 下面就具体介绍一类紧致的显式完全平方守恒的差分格式。

7.1 紧致差分格式的构造思路

紧致差分格式是一类使用较少的格点能实现较高计算精度的高精度格式, 在文献[9, 10]中有较详细的讨论。为了下面构造新格式的需要, 这里有必要对其主要思路作简要的介绍。

设 $f(x)$ 是在区间 $[0, L]$ 上的周期函数, 记 $h = L/N$, $x_i = ih$, $i = 1, 2, \dots, N$ 。不妨简记 $f_i = f(x_i)$, 而 f'_i 为 $(df/dx)_{(x_i)}$ 的逼近, 于是可以有如下的差分近似:

$$\begin{aligned} & \beta f'_{i-2} + \alpha f'_{i-1} - f'_i + \alpha f'_{i+1} + \beta f'_{i+2} \\ &= C \frac{f_{i+3} - f_{i-3}}{6h} + b \frac{f_{i+2} - f_{i-2}}{4h} + a \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}, \end{aligned} \quad (77)$$

其中 α, β, a, b, c 均为待定参数, 通过泰勒展开, 可以按精度要求不同而确定参数值所满足的不同关系式如下:

二阶精度:

$$a + b + c = 1 + 2\alpha + 2\beta, \quad (78)$$

四阶精度:

$$a + 2^2 \cdot b + 3^2 \cdot c = 2 \cdot 3! (\alpha + 2^2 \cdot \beta), \quad (79)$$

六阶精度:

$$a + 2^4 \cdot b + 3^4 \cdot c = 2 \cdot \frac{5!}{4!} (\alpha + 2^4 \cdot \beta), \quad (80)$$

.....

由此不难看到, 如果在 (3) 式中取 $a = 3/2$, $b = c = 0$, $\beta = 0$, $\alpha = 1/4$, 即可得常用的 4 阶紧致格式:

$$f'_{j-1} + 4f'_j + f'_{j+1} = \frac{3}{h} (f_{j+1} - f_{j-1}). \quad (81)$$

7.2 紧致完全平方守恒格式的构造

有关显式完全平方守恒格式在文献[6]中已作了较详细的讨论, 在本文第 5 节也作了简要介绍。下面在此基础上进一步介绍紧致平方守恒格式的构造思路。为了简单明了起见, 以一维平流方程为例作具体说明。

考虑一维非线性平流方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad a \leq x \leq b, \quad 0 \leq t \leq T \quad (82)$$

$$u|_{t=0} = u_0(x). \quad (83)$$

显然, (82) 式易于推广改写为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{3} \left(u^* \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u^* u}{\partial x} \right) = 0, \quad (84)$$

其中, u^* 为 u 的某种光滑值, 也可以取 $u^* = u$ 。按照文献[6]的做法, 可以构造与 (84) 式对应的显式差分格式如下:

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\tau} + (A_n u)_j^n + \varepsilon_n \tau (B_n u)_j^n = 0, \quad (85)$$

其中, B_n 为耗散算子, ε_n 为耗散系数, 而 A_n 满足如下公式:

$$(A_n u)_j^n = \frac{1}{3} [u_j^{*n} \cdot u_j''^n + (u^* u')_j^n]. \quad (86)$$

为使构造出的差分格式是紧致格式, 我们对 (86) 式中的函数导数项采用如下四阶紧致格式计算:

$$A f = \delta_0 f, \quad (87)$$

其中, f 可以分别取为 u 或 $u^* u$, 而

$$A = \frac{h}{3} \begin{vmatrix} 4 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 4 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 4 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 4 \end{vmatrix}, \quad (88)$$

$$f = (f_1, f_2, \cdots, f_N)^T \equiv (f_i)_N,$$

$$\delta_0 f = (f_2 - f_N, f_3 - f_1, \cdots, f_N - f_{N-1})^T \equiv (f_{i+1} - f_{i-1})_N. \quad (89)$$

根据前述的定理 6, 只要证明算子 A_n 为反对称的, 且满足定理 6 的要求, 则格式 (85) 必为显式完全平方守恒格式; 又由于其中导数项采用四阶紧致格式 (87) 式计算, 故格式 (85) 必为四阶紧致的显式完全平方守恒格式。关于算子 A_n 的反对称性证明可以参见文献[11]。具体的算例也能在文献[11]中找到, 从中可以清楚地看到紧致平方守恒格式的确提高了计算精度。

8 小结与讨论

通过以上的介绍, 已能清楚地看到, 为了实施人口、资源和环境的可持续性发展战略, 努力发展计算地球流体力学是十分重要的。经过多年的努力, 在克服计算紊乱和非线性计算不稳定方面已取得许多进展, 完全平方守恒格式也经历了隐式完全平方守恒, 显式完全平方守恒和高精度完全平方守恒等几个主要发展阶段, 使得格式更加符合实际

的需要。然而,大气、海洋和环境数值模拟问题是一类十分复杂的计算问题,实际工作又不断地提出更多更高的要求,为进一步满足实际需要,综合考虑我们的优势和薄弱环节,我们认为以下各方面应作为今后发展计算地球流体力学和大气、海洋、环境数值模拟研究的重要方向:

(1) 进一步设计出适于作大气、海洋、环境数值模拟的高精度计算格式(包括对区域模式的边界处理问题)。

(2) 发展适于计算多时间尺度的复杂过程的快速分解算法和并行算法。

(3) 发展适于计算空间结构不均匀的有效算法,如合适的套网格、自适应网格和变网格算法。

(4) 设计保持原微分方程整体性质和相互作用的计算格式,要努力克服各种非物理解。

(5) 研究“耦合退化”问题,即研究解决各分系统耦合成统一系统计算时使计算结果精度降低的问题。

(6) 研究如何区分物理的混沌现象与计算紊乱现象,并研究存在物理混沌现象时的模拟方法和预测算法问题。

(7) 研究资料同化问题,注重大面积、长序列的资料分析和同化方法的研究,积极开展大气、海洋资料插补问题的研究,特别要注重水汽通道和各种污染物通道的分析。

(8) 积极开展有关大气、海洋灾害形成过程的数值模拟研究,如大范围旱涝灾害成灾过程数值模拟、暴雨成灾过程数值模拟、海浪和台风暴潮成灾过程数值模拟等等。

(9) 积极开展环境污染问题的数值模拟,如大气污染及其防治的数值模拟、海洋污染及其防治过程的数值模拟、河流和湖泊的污染过程和污染防治的数值模拟等。

参 考 文 献

- 1 季仲贞, 1986, 计算地球物理流体力学中的非线性计算不稳定问题, 力学进展, 16(3), 16(4), 305~318.
- 2 季仲贞, 1986, 计算地球物理流体力学中的非线性计算不稳定问题(续), 力学进展, 16(4), 455~472.
- 3 曾庆存、季仲贞, 1981, 发展方程的计算稳定性问题, 计算数学, 1, 79~86.
- 4 季仲贞、曾庆存, 1982, 发展方程差分格式的构造和应用, 大气科学, 6(1), 88~94.
- 5 曾庆存、季仲贞、李荣凤, 1988, 发展方程差分格式的构造与近岸海流数值模拟, 大气科学(特刊), 166~175.
- 6 季仲贞, 1982, 平方守恒型差分格式的构造, 中期数值天气预报文集, 北京: 气象出版社.
- 7 季仲贞、王斌, 1991, 再论发展方程差分格式的构造和应用, 大气科学, 15(2), 1~10.
- 8 Zeng Qingcun, Ji Zhongzhen and Chong Quang, 1982, Designs of difference schemes for the Primitive equation, scientia sinica (Series B), No. 2, 183~199.
- 9 季仲贞、王斌, 1994, 一类高时间差分精度的平方守恒格式的构造及其应用检验, 自然科学进展, 4(2), 149~158.
- 10 S. K. Lele, 1992, Compact Finite Difference schemes with spectral-like resolution, *J. Comp. Phys.*, 103, 16~42.
- 11 Ma Yanwen and Fu Dexun, 1996, Super compact finite difference method (SCFDM) with arbitrarily high accuracy, computational Fluid Dynamics Journal, 15(2), 259~276.
- 12 季仲贞、李京、王斌, 1999, 紧致平方守恒格式的构造和检验, 大气科学, 23(3), 323~332.

Several Computational Problems in Atmospheric, Oceanic and Environmental Numerical Simulations

Ji Zhongzhen, Wang Bin and Zeng Qingcun

(State Key Laboratory of Numerical Modeling for Atmospheric Sciences and Geophysical Fluid Dynamics,
Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029)

Abstract In order to satisfy the requirement of developing climate and environment numerical simulation, several closely related computational problems are introduced in this paper. First, computing chaos, nonphysical solutions, and nonlinear computational instability are often discovered in these problems. At the same time three reasons that result in these problems are discussed. These reasons are false dispersion, disconstruction of energy relationship, and nonlinear displacement of energy spectrum. Then these problems are contributed to a kind of "evolution equation", several related theorems are presented, and the relationship between computational stability, energy conservation and nonnegative of operator is discussed. Furthermore, some construction methods of complete square-conservation difference schemes are introduced, including implicit and explicit complete square-conservation difference schemes, high time-accuracy and high-order compact complete square-conservation difference schemes. At the same time, several computing examples are presented to show the computational effects of these schemes. At last, this paper is summarized and a few important problems which need further research are proposed.

Key words climate numerical simulation environment numerical simulation computing chaos nonlinear computational instability complete square conservation compact difference scheme